

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

SISTEMAS CURVOS DE GRAFENO E ESFERAS FUZZY

DEIGIVAN DA SILVA

João Pessoa
2017

DEIGIVAN DA SILVA

SISTEMAS CURVOS DE GRAFENO E ESFERAS FUZZY

Dissertação apresentada no Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.
Orientador: Prof. Dr. Claudio B. Silva Furtado

João Pessoa
2017

S586s Silva, Deigivan da.
Sistemas curvos de grafeno e esferas fuzzy / Deigivan da Silva.-
João Pessoa, 2017.
84 f. : il.-

Orientador: Profº. Drº. Claudio B. Silva Furtado.
Dissertação (Mestrado) – UFPB/CCEN

1. Física. 2. Grafeno. 3. Geometria Não-Comutativa.
4. Esfera Fuzzy. I. Título.

UFPB/BC

CDU – 53(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de
Dissertação de **Mestrado** do aluno **Deigivan
da Silva**, candidato ao Título de Mestre em
Física na Área de Concentração Física das
Partículas Elementares e Campos.

1 Aos sete dias do mês de março do ano de dois mil e dezessete, às 10h00, na sala de
2 reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar o candidato ao grau de Mestre em Física na área de Física das
5 Partículas Elementares e Campos, **Deigivan da Silva**. A comissão examinadora
6 composta pelos professores doutores: Cláudio Benedito da Silva Furtado (DF/UFPB),
7 orientador e presidente da banca examinadora, Inácio de Almeida Pedrosa (DF/UFPB) e
8 Claudionor Bezerra (UFRN). Dando início aos trabalhos, o Prof. Cláudio Benedito da
9 Silva Furtado comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a
10 palavra o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de
11 dissertação intitulado “*Sistemas curvos de grafeno e esferas fuzzy*”. Concluída a
12 exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte
13 parecer: “**aprovado**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o
14 respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, Danilo
15 Wilson Lemos Menezes, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da
16 Banca Examinadora. João Pessoa, **07 de março de 2017**.

17

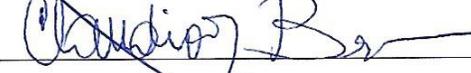
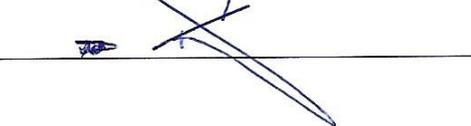
Prof. Dr. Cláudio Benedito da Silva Furtado
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Inácio de Almeida Pedrosa
UFPB

Prof. Dr. Claudionor Bezerra
UFRN

Lic. Danilo Wilson Lemos Menezes
Técnico em Assuntos Educacionais





DEDICATÓRIA

À minha família.

À memória de minha avó Maria José, que cuidou de mim, sendo uma segunda mãe.

AGRADECIMENTOS

Ao senhor Deus, que sempre me deu forças para seguir em frente.

À minha família, que sempre me apoiou na conquista dos meus objetivos, em especial minha mãe Maria Claudia, que é um excelente exemplo de perseverança e a quem eu me espelho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Claudio Furtado, pela paciência e ótima orientação, mostrando-me que o aprendizado é um processo lento e necessita de perseverança.

Ao meu amigo Bruno Mesquita, que me ajudou nos momentos mais difíceis, e me ensinou que humildade não é tudo para o sucesso, mas tem um importante papel.

Ao meu amigo Thibério, que foi um ponto de apoio importantíssimo no início desta nova etapa de minha formação.

Aos amigos de infância, cuja amizade sempre preservarei não importa onde esteja: Janailso, Carlos, Rosalve, Daniel, Alan, Pedro, Paulo, Tiago, Thiago, André, Maurício, Patrícia, Janaina, Jerote, Jardel, dentre muitos outros.

Aos amigos que fiz durante esta caminhada: Helena, Fabiano, Artur, Amaro, Paulo Porfírio, Gabriel, Antônio, Anderson, Jannaira, Thiago (Japa), Eduardo, Bruno, Anny, Marcílio, Sr. Mariano e também àqueles da residência universitária.

Ao Prof. Dr. João Plascak, por sempre ter me atendido para tirar dúvidas.

Aos amigos do local onde me formei (URCA), Job Saraiva, Daniela Leite, Marciano, Hercules, Carlos entre outros. Aos mentores, professores da URCA, Wilson Hugo, Augusto Nobre, e em especial, Claudio Dantas e Eduardo Sousa.

À CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Neste trabalho, desenvolvemos um estudo completo do modelo de Landau relativístico e da geometria não-comutativa, esta última derivada a partir da projeção de nível, seguindo a abordagem feita por K. Hasebe no artigo [Int. J. Mod. Phys. A 31,1650117 (2016)], afim de descrever sistemas curvos de grafeno. No desenvolvimento da teoria, abordamos o problema de autovalores do operador Dirac-Landau relativístico sobre uma esfera com um monopolo magnético em seu centro. As esferas fuzzy relativísticas são introduzidas usando-se os autoestados dos níveis de Landau relativísticos e uma comparação é feita com os casos não-relativísticos. Sob deformação da massa, as esferas fuzzy correspondentes a níveis de Landau relativísticos simétricos modificam seus tamanhos, mas para modos-zero não há variação do tamanho para a esfera fuzzy correspondente. Em sequência verifica-se que o modelo de Landau relativístico e o sistema não-relativístico de Pauli-Schrödinger estão relacionados por uma transformação de gauge $SU(2)$. Finalmente, a aplicação de todo o esse arcabouço teórico no grafeno, mostra que seu espectro é simétrico com respeito a energia zero, e mantém-se mesmo sob deformação da massa. Por outro lado, a influência do parâmetro de massa $M \neq 0$ nas quatro esferas fuzzy (2 para cada vale) é tal que, se $n \neq 0$, duas delas aumentam e as outras duas diminuem, mas para $n = 0$ as esferas fuzzy (em $\pm M$) não mudam seus tamanhos.

Palavras-chave: Grafeno. Geometria Não-Comutativa. Esfera Fuzzy.

ABSTRACT

In this work, we developed a complete study on the relativistic Landau model and non-commutative geometry, the latter was derived from level projection, in order to describe curved graphene systems. In developing of the theory, we address the problem of the eigenvalues from the relativistic Dirac-Landau operator on the sphere with a magnetic monopole in its center. The relativistic fuzzy spheres are introduced using the eigenstates of the relativistic Landau levels and we compare it with non-relativistic cases. Under mass deformation, the fuzzy spheres relative to the relativistic symmetric Landau levels change their sizes, however zero-modes there are no variation of size for the corresponding fuzzy sphere. Consecutively we verify that the relativistic Landau model and non-relativistic system of Pauli-Schrödinger are related by gauge transformation $SU(2)$. And finally, the application of the whole theoretical graphene's framework show a symmetric spectrum with respect to its zero energy, and it maintains itself under mass deformation. On the other hand, the influence of the mass parameters $M \neq 0$ on the four fuzzy spheres (two for each valley) is such that, if $n \neq 0$, two of them are enlarged and the other two are diminished, but for $n = 0$ the fuzzy spheres (at $\pm M$) do not change their sizes.

Keywords: Graphene. Non-commutative Geometry. Fuzzy Sphere.

SUMÁRIO

1	Introdução	5
2	Grafeno: Um Cristal 2D	7
2.1	O Carbono e suas Formas Alotrópicas	7
2.2	Propriedades do Grafeno	8
2.3	Configuração Eletrônica do Grafeno	9
2.4	Estrutura Cristalina e Espectro de Energia	11
2.4.1	Estrutura Cristalina do Grafeno	11
2.4.2	Espectro de Energia do Grafeno	13
2.4.3	Férmions Livres Sem Massa	16
2.5	Grafeno com Defeitos Topológicos	19
2.5.1	Defeitos Topológicos em Cristais	19
2.5.2	Defeitos Topológicos no Grafeno	20
2.6	A Molécula de Fulereo	24
2.6.1	Introdução	24
2.6.2	O Espectro Eletrônico do Fulereo	25
3	Não-Comutatividade e Esfera Fuzzy	27
3.1	Modelo de Landau Relativístico sobre uma Esfera	27
3.1.1	Operador Momento Angular SU(2) e a Conexão de Spin	28
3.1.2	O Problema de Autovalores para $-i\mathcal{D}$	31
3.2	Geometria Não-Comutativa e a Projção de Nível	35
3.2.1	Projção do Nível de Landau e Geometria Não-Comutativa	36
3.2.2	Projção para Níveis de Landau Não-Relativísticos	37
3.2.3	Projção para Níveis de Landau Relativísticos	39
3.3	Deformação da Massa no Modelo de Landau Relativístico	41
3.3.1	Deformação da Massa	42
3.3.2	Introdução de Esferas Fuzzy via Deformação da Massa	45
3.4	Relações com o Sistema de Pauli-Schrödinger	47

3.4.1	Transformação de Gauge $SU(2)$ e a Álgebra do Grupo de Lorentz $SO(3, 1)$	47
3.4.2	O Problema de Autovalores para $\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$	51
3.4.3	Relações entre os Autoestados de $-i\mathcal{D}$ e \mathcal{H}_{P-S}	53
4	Aplicações de Esfera Fuzzy em Grafeno	56
4.1	Vales das Esferas Fuzzy do Grafeno	56
4.1.1	Espectro do Grafeno	56
4.1.2	Deformação da Massa e Vales das Esferas Fuzzy \mathbf{K}_+ , \mathbf{K}_-	58
5	Conclusões e Perspectivas	62
A	Modelo de Landau Não-Relativístico	64
A.1	Hamiltoniano de Landau Não-Relativístico	64
A.2	Relações com os operadores Edth	71
	Referências	73

LISTA DE FIGURAS

2.1	Exemplos de alótropos do carbono.	8
2.2	Tipos de hibridizações do carbono.	9
2.3	(a) Grafeno. Matriz geradora de (b) fulereno (0D), (c) nanotubo de carbono (1D) e (d) grafite (3D).	10
2.4	Representação da célula unitária (losango em linha sólida), sub-rede A (átomos azuis), sub-rede B (átomos vermelhos), vetores da base do espaço direto a_1 e a_2 , vetores dos primeiros vizinhos $v_{j=1,2,3}$ e $w_{j=1,2,3}$	12
2.5	1ª Zona de Brillouin e os pontos de alta simetria K, K', M e Γ . . .	14
2.6	Estrutura de Bandas do grafeno com destaque para os pontos de alta simetria K, K', M, Γ e a 1ª Zona de Brillouin.	16
2.7	Processo de “corte e colagem” para o caso do defeito pentagonal.	21
2.8	Conexão de átomos de mesma sub-rede.	24
2.9	Fulereno C_{60} com os átomos de carbono em destaque.	25
2.10	Icosaedro (a). Face do icosaedro com rede favo-de-mel inscrita (b).	25
3.1	Autovalores, autoestados, degenerescência do operador Dirac-Landau e a relação entre autoestados com autovalores de sinais opostos pela transformação quiral.	35
3.2	Os círculos ilustram as esferas fuzzy sobre os níveis de Landau relativísticos. Os tamanhos das esferas são idênticos para $\pm\kappa_n$ e decrescem monotonicamente com n . ($g = 3$ foi adotado na figura.)	40
3.3	Gráficos dos raios das esferas fuzzy com respeito a g . As curvas sólidas e tracejadas correspondem aos casos não-relativístico ($\mathcal{R}_n^{(g)}/r$) e relativístico ($\mathcal{R}_n^{l(g)}/r$), respectivamente. As cores preto, vermelho e verde são respectivamente para $n = 0, 1, 2$	41
3.4	Espectro do operador Dirac-Landau <i>com</i> e <i>sem</i> o termo de massa.	45
3.5	Mudança do tamanho da esfera fuzzy sob deformação da massa. O círculo vermelho representa a esfera fuzzy para $n = 0$ enquanto que os círculos azuis indicam as esferas fuzzy para os autovalores $\pm\kappa_{n=3}$ ($g = 3$ e $M = 2$ foram adotados.)	47

-
- 4.1 Espectro do hamiltoniano do grafeno *com e sem* deformação da massa. Os pequenos círculos azul e verde, correspondem respectivamente aos autoestados dos operadores Dirac-Landau em K_+ e K_- 60
- 4.2 Mudança nos tamanhos das esferas fuzzy (representadas pelos círculos) sob deformação da massa nos níveis de Landau correspondentes. 61

Capítulo 1

Introdução

Ao longo das últimas décadas, o interesse no estudo de fenômenos em nível atômico e molecular, levou ao surgimento da nanociência e nanotecnologia. Estas são áreas de extrema importância, pois elas lidam com o projeto, a manipulação e a produção, na escala nanométrica, ou seja, elas prometem tornar as coisas menores, mais rápidas, mais resistentes e mais eficientes. Pretende-se então entender como a matéria se comporta na escala supracitada, ressaltando o fato que, muitas vezes, há grandes divergências em suas propriedades macroscópicas e nanoscópicas. As técnicas usadas para o desenvolvimento desse estudo das pequenas dimensões, vêm da integração da física, química e biologia, além das ciências aplicadas, tais como engenharia e modelagem computacional. Devido suas propriedades peculiares de formar materiais tão distintos, o carbono é considerado um dos principais “objetos” para a pesquisa em nanociência e nanotecnologia.

O carbono é um dos elementos mais versáteis da natureza que possui a capacidade de formar diferentes estruturas na escala nanométrica, pela organização espacial das ligações entre os átomos do mesmo tipo, tais estruturas são denominadas formas alotrópicas. A exemplo de uma destas formas podemos citar o grafeno, que vem ganhando destaque há alguns anos, devido suas propriedades peculiares. Sendo um cristal bidimensional, é um elemento matriz para a sintetização de outros materiais grafiticos com outras dimensões, como, nanotubos (1D) e fulerenos (0D)[13]. Além disso, devido seu espectro incomum, o grafeno permite simular e testar fenômenos quantum relativísticos, que não são possíveis de serem observados na física de altas energias.

No capítulo 2, descrevemos algumas das principais propriedades e a estrutura eletrônica do grafeno. Determinamos seu espectro de energia e o analisamos no limite de baixas energias, donde mostramos que a relação de dispersão é linear,

significando que seus portadores de carga simulam partículas relativísticas, sendo portanto descritas por uma equação de Dirac. Devemos ressaltar que, não há nada de relativístico no movimento dos elétrons em torno do átomo, mas a interação destes com o potencial periódico da rede é que produz quasipartículas, estas denominadas Férmions de Dirac sem massa e com uma velocidade de luz efetiva $v_F \approx 10^6 m s^{-1}$ [13]. Tratamos também do caso do grafeno com defeitos topológicos tipo desclinação e em seguida da molécula de fulereno, onde determinamos seu espectro.

No capítulo 3, abordamos o modelo de Landau relativístico sobre uma esfera (o caso não-relativístico é analisado no apêndice A), sendo este descrito pelo operador Dirac-Landau. O estudo é feito com base em métodos algébricos e pode ser aplicado à geometria não-comutativa, isolantes topológicos e grafeno [7]. Mostra-se que no contexto do modelo de Landau, a geometria não-comutativa é ‘gerada’ como consequência da projeção de nível, e esta última é usada como uma ferramenta para a introdução de esferas fuzzy (geometrias fuzzy). Em seguida, investigamos o comportamento das esferas fuzzy sob deformação da massa, e vemos que esferas fuzzy relativísticas para autovalores de sinais opostos do operador Dirac-Landau massivo, têm seus tamanhos alterados, de modo que a soma dos raios seja constante. Mostra-se também que o modelo de Landau relativístico e o sistema não-relativístico de Pauli-Schrödinger estão relacionados apenas por uma transformação $SU(2)$.

No capítulo 4, aplicamos todo o arcabouço teórico visto sobre modelo de Landau relativístico e esferas fuzzy no grafeno. Neste sistema, estuda-se as esferas fuzzy com os graus de liberdade dos vales \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , e seus comportamentos sob deformação da massa.

Finalmente, no capítulo 5, apresentamos as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Grafeno: Um Cristal 2D

Neste capítulo faremos uma revisão sobre o Grafeno, considerado genuinamente um cristal bidimensional [3], abordando sua constituição química, configuração eletrônica e algumas propriedades. Discutiremos a estrutura cristalina, no contexto da física do estado sólido e o espectro de energia (assim como a estrutura de bandas), que será obtido por um método de operadores (na verdade uma variante do método *tight binding*) [28]. Mostraremos que, no limite de baixas energias, o grafeno pode ser descrito por uma teoria de dois espinores bidimensionais de Dirac [1]. Veremos também o caso do Grafeno com defeito topológico (do tipo desclinação) [2]. Por fim, faremos uma breve descrição do fulereno (um derivado do grafeno), que constitui o caso esférico¹.

2.1 O Carbono e suas Formas Alotrópicas

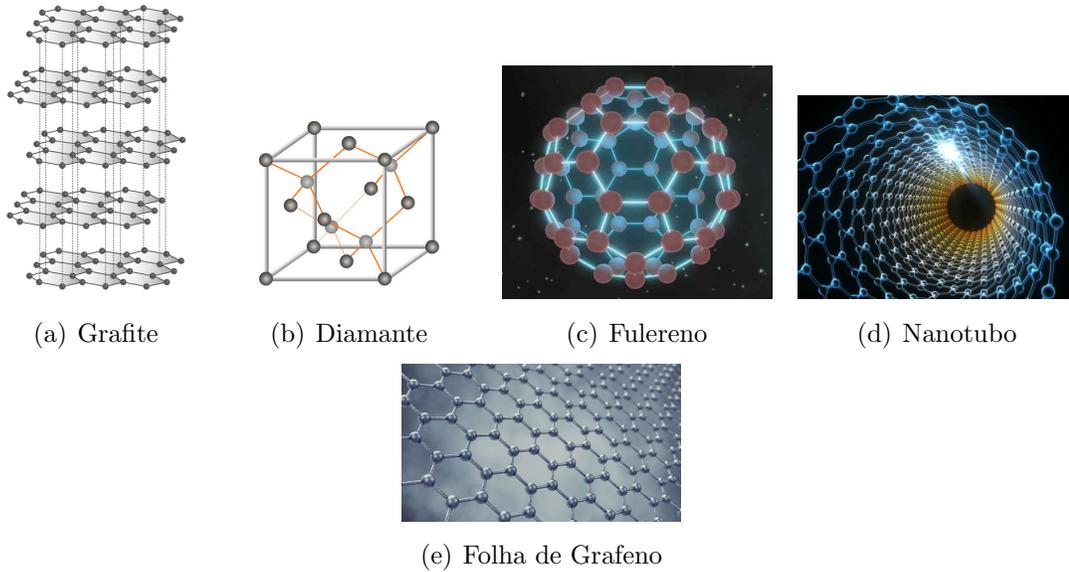
O carbono (C), número atômico 6 (6 prótons e 6 elétrons), sólido à temperatura ambiente, é um membro do grupo 14 da tabela periódica, sendo um elemento abundante no universo, e estando presente tanto em compostos orgânicos quanto em inorgânicos. Tal elemento possui a propriedade de ligar-se quimicamente de várias formas aos demais átomos, podendo hibridizar-se² via: sp , sp^2 e sp^3 [3]. Dentre os vários compostos derivados do carbono podemos citar (além de outros essenciais à vida), por exemplo, o dióxido de carbono (CO_2), essencial para o crescimento das

¹Para um estudo mais detalhado sobre o fulereno consulte a referência [3].

²A hibridização é o fenômeno pelo qual os orbitais atômicos incompletos, no caso os subníveis s e p , se combinam dando origem a novos orbitais, os quais possuem características mescladas de ambos, ou seja, orbitais híbridos [1].

plantas, os hidrocarbonetos, que têm papel importante tanto na indústria quanto no transporte e as formas alotrópicas³ tais como: grafite, diamante, folhas de grafeno, nanotubos de carbono e fulerenos (ver fig. 2.1).

Figura 2.1: Exemplos de alotropos do carbono.



Fonte: Google

De acordo com a figura 2.1 o grafeno consiste de uma folha plana de átomos de carbono que formam uma rede hexagonal [13]. Apesar de ter uma estrutura geométrica relativamente simples, tal material possui propriedades surpreendentes que veremos na próxima seção.

2.2 Propriedades do Grafeno

Vimos na seção 2.1 que o grafeno é uma das formas alotrópicas do carbono, sendo considerado essencialmente um cristal bidimensional. É um composto que vem ganhando destaque no meio científico, e pode-se dizer que isto é uma consequência, em partes, de suas peculiares propriedades [8]:

↪ **Transparência Ótica:** O grafeno é praticamente transparente, absorve apenas 2,3% da intensidade da luz, independentemente do comprimento de onda

³Esta é uma denominação usada para os compostos originados de elementos que possuem a propriedade da alotropia - a formação de substâncias simples a partir dos diferentes arranjos em suas ligações.

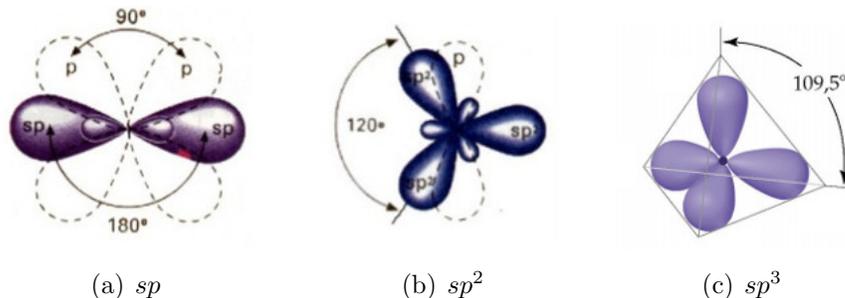
no domínio ótico. Esse número é dado por $\pi\alpha$ onde α é a constante de estrutura fina. Logo, o grafeno suspenso não exibe qualquer cor [9];

- ↪ **Resistência:** O grafeno tem uma resistência à ruptura de 42 N/m, sendo 100 vezes mais forte que uma folha do melhor aço (cuja resistência é 0,40 N/m) com mesma espessura, isto é, $3,35 \text{ \AA} = 3,35 \times 10^{-10} \text{ m}$ [10];
- ↪ **Condutividade Elétrica:** Uma camada de grafeno tem condutividade elétrica da ordem de $0,96 \times 10^6 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$, ligeiramente maior que a do cobre, que é de $0,60 \times 10^6 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$ [11];
- ↪ **Condutividade Térmica:** A condutividade térmica do grafeno é dominada por fônons e tem valor de aproximadamente $5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, enquanto que o cobre à temperatura ambiente tem condutividade térmica de $401 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Então o grafeno conduz pouco mais de 10 vezes que o cobre [12].

2.3 Configuração Eletrônica do Grafeno

O fato de o carbono ser abundante no universo é uma consequência de sua configuração eletrônica [14]: $1s^2 2s^2 2p^2$, a qual permite que suas ligações químicas com outros átomos do mesmo tipo sofram hibridização (ou hibridação). Tal processo ocorre essencialmente quando o átomo é excitado, ou seja, quando um elétron ganha energia suficiente e passa para um orbital vazio, de modo que os orbitais atômicos incompletos fundem-se dando origem ao que chamamos de orbitais híbridos. No caso do grafeno, a hibridação é do tipo sp^2 e isto significa que um orbital $2s$ combina-se com dois orbitais $2p$ dando origem a três ligações σ e uma ligação π , dispostas numa geometria trigonal planar com ângulo de 120° (ver fig. 2.2).

Figura 2.2: Tipos de hibridizações do carbono.

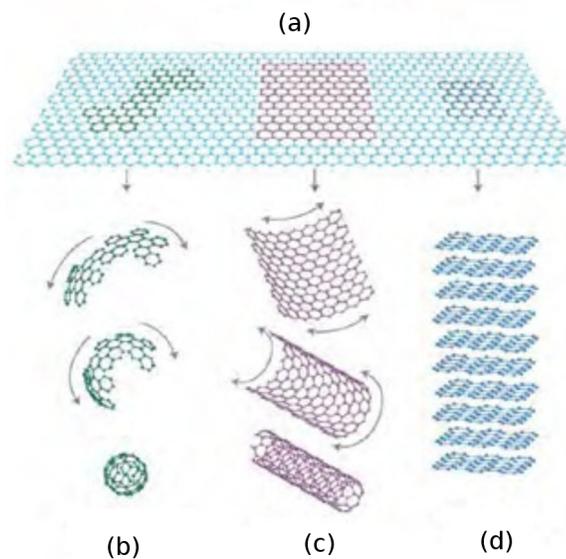


Fonte: Google

Nesse arranjo trigonal planar, as ligações σ (mais fortes) fazem o papel de garantir a estabilidade estrutural da molécula enquanto que a ligação π (mais fraca), que é onde o elétron de valência se encontra, é responsável pelas propriedades eletrônicas [14].

Uma vez que o grafeno é visto como uma cristal bidimensional, constituído por uma rede hexagonal de átomos de carbono com hibridação sp^2 [13], vale ressaltar que o mesmo é o elemento estrutural mais básico para formação de alguns alótropos do carbono, assim, sua estrutura é considerada uma matriz para a geração dessas formas alotrópicas (ver fig. 2.3).

Figura 2.3: (a) Grafeno. Matriz geradora de (b) fulereno (0D), (c) nanotubo de carbono (1D) e (d) grafite (3D).



Fonte: Referência [13]

Ao observar a figura 2.3 vemos que o fulereno [15] pode ser conseguido com a dobra de uma folha de grafeno em uma estrutura zero dimensional⁴, por outro lado o nanotubo de carbono [16] pode ser obtido dobrando-se uma camada de grafeno em um tubo unidimensional⁵. O fulereno e o nanotubo de carbono são classificados como materiais sintéticos.

⁴Essa dimensão para o fulereno é uma convenção, devido sua estrutura fechada ser semelhante a um ponto.

⁵Essa dimensão para o nanotubo de carbono também é uma convenção, devido sua estrutura ser semelhante a um fio cujo interior é ôco.

Encontrado na natureza, o grafite é constituído por várias folhas (ou camadas) de grafeno, sendo estas últimas interligadas pelas forças de Van Der Waals, mas estas ligações são fracas e portanto permitem o deslizamento de uma camada sobre a outra pela ação de forças externas.

Historicamente o grafeno já havia sido observado experimentalmente antes mesmo do seu isolamento e identificação em 2004 por meio da técnica de clivagem micromecânica [17]. Este fato levou ao contestamento do paradigma da inexistência de cristais bidimensionais ao mesmo tempo que permitiu a observação de fenômenos físicos interessantes [18, 19, 20], como por exemplo, o comportamento tanto de condutor quanto semicondutor do grafeno, isto porque sua estrutura de bandas, como veremos mais adiante, tem “*gap*” nulo [11]. Como já afirmamos o grafeno é um excelente condutor elétrico e o que corrobora isto é o fato de, mesmo à temperatura ambiente, tal material conduzir elétrons mais rápido que qualquer outra substância [21]. Certamente esta característica é devido que seus portadores de carga viajam distâncias da ordem de micrômetros sem espalhamento [22, 23] e foi constatado que é razoável o controle desses portadores à temperatura ambiente [20]. Devido esta e outras propriedades únicas do grafeno, o mesmo pode encontrar utilidade nas mais variadas aplicações como, por exemplo, de dispositivos eletrônicos maleáveis [24]. Além disso possibilita estudos sobre tunelamento quântico, pontos quânticos [25] e membranas livres [26]. Podemos concluir então que o grafeno tem um papel de grande relevo na sociedade observada a combinação de familiaridade, propriedades extraordinárias e sua facilidade de isolamento.

2.4 Estrutura Cristalina e Espectro de Energia

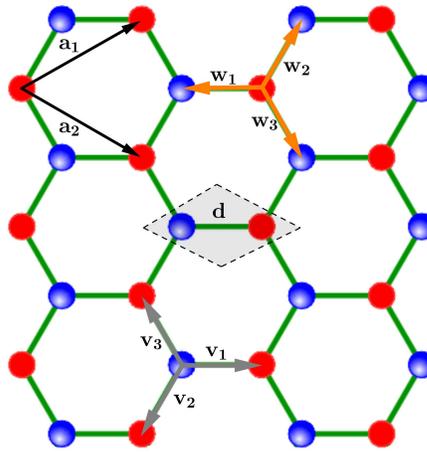
As propriedades eletrônicas do grafeno são compreendidas a partir do seu espectro de energia e sua estrutura de bandas, sendo esta última construída usando a rede recíproca associada ao arranjo geométrico deste material.

2.4.1 Estrutura Cristalina do Grafeno

Sabemos que o grafeno possui uma rede cristalina hexagonal plana também conhecida como *honeycomb* ou “*favo de mel*”, e esta, por sua vez, pode ser vista como a sobreposição de duas sub-redes triangulares que rotularemos por A e B. Estas subredes, que são redes de Bravais, podem ser construídas a partir da figura 2.4 considerando a simetria de translação dos vetores da base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 : a sub-rede A gerada pelo vetor $\mathbf{R}_i = g_i\mathbf{a}_1 + h_i\mathbf{a}_2$ e a sub-rede B com vetor gerador $\mathbf{R}_i = g_i\mathbf{a}_1 + h_i\mathbf{a}_2 + \mathbf{d}$,

onde g_i e $h_i \in \mathbb{Z}$ e $\mathbf{d} = d_0(-1, 0)$ é a origem do sistema na célula unitária com $d_0 = 1,42 \text{ \AA}$ representando a distância de separação entre átomos de carbono adjacentes [8]. Cada sítio de uma sub-rede interage com outros três, seus primeiros vizinhos, da outra sub-rede, por meio dos vetores $\mathbf{v}_{j=1,2,3}$ (sub-rede A) e $\mathbf{w}_{j=1,2,3}$ (sub-rede B).

Figura 2.4: Representação da célula unitária (losango em linha sólida), sub-rede A (átomos azuis), sub-rede B (átomos vermelhos), vetores da base do espaço direto \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , vetores dos primeiros vizinhos $\mathbf{v}_{j=1,2,3}$ e $\mathbf{w}_{j=1,2,3}$.



Fonte: Google

Admitindo uma folha de grafeno perfeita, isto é, plana e infinita, podemos mostrar que os vetores da base são dados por,

$$\mathbf{a}_1 = d_0 \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \text{e} \quad \mathbf{a}_2 = d_0 \left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.1)$$

Usando (2.1) obtemos $a_1 = a_2 = 3d_0^2 = 2,46 \text{ \AA}$, sendo que este valor representa a constante de rede⁶. Lembrando que a origem do sistema está na célula unitária, $\mathbf{d} = d_0(-1, 0)$, após um pouco de álgebra calculamos que:

$$\mathbf{v}_1 = d_0(1, 0), \quad \mathbf{v}_2 = d_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{v}_3 = d_0 \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.2)$$

$$\mathbf{w}_1 = d_0(-1, 0), \quad \mathbf{w}_2 = d_0 \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{w}_3 = d_0 \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.3)$$

⁶Constantes de rede são números que especificam o tamanho de uma célula unitária [27].

Sejam \mathbf{K}_1 e \mathbf{K}_2 os vetores da rede recíproca, podemos escrevê-los genericamente como,

$$\mathbf{K}_1 = (p_1, q_1) \text{ e } \mathbf{K}_2 = (p_2, q_2) \quad (2.4)$$

e devemos exigir que,

$$\mathbf{K}_j \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

onde $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$

Dos vetores da base (2.1) e usando as equações acima, recaímos em dois sistemas (lineares) de duas equações envolvendo as componentes de \mathbf{K}_1 e \mathbf{K}_2 . Após resolvermos chegamos a,

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{d_0} \left(\frac{2\pi}{3}, 2\pi \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \text{ e } \mathbf{K}_2 = \frac{1}{d_0} \left(\frac{2\pi}{3}, -2\pi \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \quad (2.5)$$

Donde obtemos que $K_1 = K_2 = \sqrt{16\pi^2/9d_0^2} = 4\pi/3d_0$, sendo este o valor da constante de rede no espaço recíproco. Na figura 2.5 é mostrada a 1ª Zona de Brillouin com os pontos,

$$\Gamma = (0, 0), \quad \mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3d_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}d_0} \right), \quad \mathbf{M} = \left(\frac{2\pi}{3d_0}, 0 \right)$$

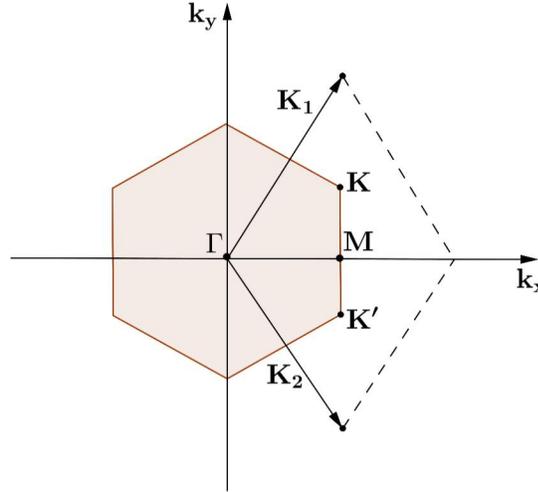
além de outros que estão associados a certas simetrias intrínsecas [1]. Veremos mais adiante que nos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' estão localizados os “cones de Dirac” associados a estrutura de bandas do grafeno.

2.4.2 Espectro de Energia do Grafeno

Nosso objetivo agora é determinar o espectro de energia para os orbitais das ligações π (mais fracas), responsáveis pela condução dos elétrons. Tal espectro de energia nos permite compreender algumas das propriedades eletrônicas do grafeno e entender o fenômeno de transporte neste material [28, 29]. Começaremos expressando o hamiltoniano *tight-binding*⁷ dos orbitais π como [28],

$$\mathcal{H} = -\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j \quad (2.6)$$

⁷Neste método descreve-se os estados quânticos de uma partícula como combinação linear dos orbitais atômicos (sítios), supondo existência de sobreposição das funções de onda entre sítios vizinhos. Para mais detalhes consulte o cap. 10 da referência [27].

Figura 2.5: 1ª Zona de Brillouin e os pontos de alta simetria \mathbf{K} , \mathbf{K}' , \mathbf{M} e Γ .

onde $\langle \rangle$ indica soma sobre os pares de átomos i, j mais próximos na rede e a_i^\dagger, a_j são operadores anticomutativos, tais que:

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.7)$$

Em (2.6) o termo λ é conhecido como “hopping”, ou transferência, que é a probabilidade de transição mediante o fenômeno de tunelamento. Os índices i, j representam os sítios da rede onde está ocorrendo a transferência. Por outro lado, os operadores a_i^\dagger, a_j^\dagger criam um elétron nas sub-redes A e B, respectivamente, enquanto que os operadores a_i, a_j aniquilam um elétron nas sub-redes A e B.

Lembrando que \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os geradores da rede do grafeno, podemos interpretá-los como operadores translação⁸. Com isso, definindo o autoestado de \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 como,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_A} C_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle + \sum_{i_B} C_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle \quad (2.8)$$

cujo complexo conjugado é,

$$\langle\Psi| = \sum_{j_A} C_A^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \langle O| a_j + \sum_{j_B} C_B^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \langle O| a_j \quad (2.9)$$

onde $|O\rangle$ representa o estado fundamental.

⁸A rede é produzida por aplicações repetidas deles.

Aplicando o hamiltoniano (2.6) no autoestado (2.8), e usando as relações de anticomutação (2.7), obtemos,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{i_A} C_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger a_j a_i^\dagger |O\rangle - \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{i_B} C_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger a_j a_i^\dagger |O\rangle \\
&= -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \sum_{i_A} C_B a_i^\dagger |O\rangle - \lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \sum_{i_B} C_A a_i^\dagger |O\rangle \\
&= -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_j} \sum_{i_A} C_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle - \lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_j} \sum_{i_B} C_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle \quad (2.10)
\end{aligned}$$

Onde fizemos $C_A \rightarrow C_B$ no 1º termo e $C_B \rightarrow C_A$ no 2º termo⁹, além de usarmos $\mathbf{r}_j = \mathbf{w}_j + \mathbf{r}_i$ para os átomos B e $\mathbf{r}_j = \mathbf{v}_j + \mathbf{r}_i$ para os átomos A¹⁰.

Fazendo a diagonalização $E_{\mathbf{k}} = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$, obtemos,

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle = -\lambda \sum_j C_A^* C_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_j} - \lambda \sum_j C_B^* C_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_j} = E_{\mathbf{k}} \quad (2.11)$$

Por outro lado considerando $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \Rightarrow |C_B|^2 + |C_A|^2 = 1$ e usando isso expressamos (2.11) na forma matricial como,

$$E_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} C_B \\ C_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_j} \\ -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_B \\ C_A \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

A equação (2.12) é basicamente um problema de autovalores e autovetores onde estes últimos são obtidos ao determinarmos C_B e C_A . Para os autovalores precisamos calcular,

$$\det \begin{pmatrix} -E_{\mathbf{k}} & -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_j} \\ -\lambda \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_j} & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.13)$$

Donde obtemos,

$$\begin{aligned}
E_{\mathbf{k}}^2 &= \lambda^2 (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}_3}) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_3}) \\
&= \lambda^2 (3 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_2 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_3} \\
&\quad + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_3 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_2 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_3} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_3 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{w}_2}) \quad (2.14)
\end{aligned}$$

onde usamos o fato que $\mathbf{w}_j = -\mathbf{v}_j$ devido a simetria da rede. Agora aplicando (2.3) em (2.14) e usando as relações trigonométricas $e^{i\phi} + e^{-i\phi} = 2 \cos \phi$ e $\cos^2 \phi = \frac{1}{2} + \frac{\cos 2\phi}{2}$ chegamos na relação de dispersão,

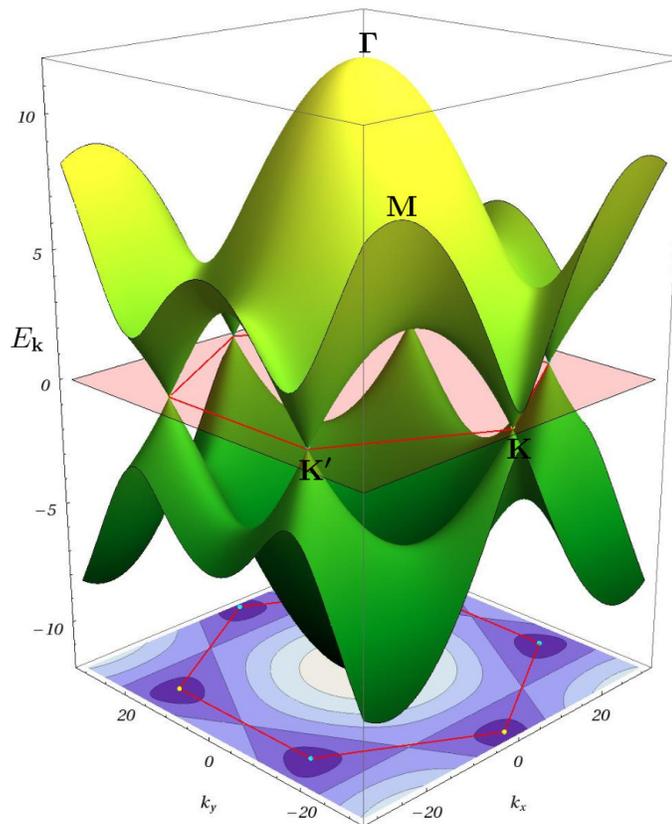
$$E_{\mathbf{k}} = \pm \lambda \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y d_0 \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y d_0 \right) \cos \left(\frac{3}{2} k_x d_0 \right)} \quad (2.15)$$

⁹Essa manipulação é justificada pelo fato que, sob a ação do hamiltoniano, os pontos na sub-rede A são mapeados nos pontos da sub-rede B e viceversa [28].

¹⁰Estas expressões são condições de vínculo entre as sub-redes.

A eq. (2.15) nos diz que o espectro de energia de uma partícula corresponde a duas superfícies $E_{\mathbf{k}} > 0$ e $E_{\mathbf{k}} < 0$ as quais se tocam quando $E_{\mathbf{k}} = 0$ em seis pontos correspondentes aos vértices da 1ª Zona de Brillouin. Os estados $E_{\mathbf{k}} < 0$ (bandas de valência) estão preenchidos enquanto que os estados $E_{\mathbf{k}} > 0$ (bandas de condução) estão vazios, assim, a estrutura de bandas é semi-preenchida e o nível de Fermi localiza-se nos seis pontos para os quais $E_{\mathbf{k}} = 0$. A figura 2.6 mostra a estrutura de bandas do grafeno (onde $\lambda \approx 2,7$ eV) e a 1ª ZB. Perceba que nos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' estão localizados os “cones de Dirac” como havíamos afirmado em 2.4.1.

Figura 2.6: Estrutura de Bandas do grafeno com destaque para os pontos de alta simetria $\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{M}, \Gamma$ e a 1ª Zona de Brillouin.



Fonte: <http://oer.physics.manchester.ac.uk/>

2.4.3 Férmions Livres Sem Massa

Nosso interesse agora é estudar o caso limite de $E_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, isto é, o comportamento do grafeno próximo aos pontos de Fermi. Para tanto definiremos o vetor

$\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}$ onde $\mathbf{K}_\pm = \left(\pm \frac{2\pi}{3d_0}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}d_0} \right)$, no entanto vamos usar \mathbf{K}_+ , temos,

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{3d_0} + p_x \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}d_0} + p_y \right) \hat{\mathbf{y}} \quad (2.16)$$

Substituindo (2.16) em (2.15) e usando a propriedade que $\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$, obtemos,

$$E_{\mathbf{k}}^2 = \lambda^2 \left\{ 1 + 4 \left[\frac{1}{2} \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} d_0 p_y \right) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \left(\frac{\sqrt{3}}{2} d_0 p_y \right) \right]^2 - 4 \left[\frac{1}{2} \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} d_0 p_y \right) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \left(\frac{\sqrt{3}}{2} d_0 p_y \right) \right] \cos \left(\frac{3}{2} d_0 p_x \right) \right\} \quad (2.17)$$

Podemos agora obter uma expressão aproximada para $E_{\mathbf{k}}$ considerando $p \ll K_+$ (limite de pequenos momentos), o que nos permite expandir em série de Taylor os senos e cossenos em (2.17) e ao desprezarmos os termos de ordem 3 em diante nas componentes do momento chegamos a [30],

$$E_{\mathbf{k}} \simeq \pm \frac{3}{2} d_0 \lambda \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \pm v_F p, \quad \text{onde } v_F = \frac{3}{2} d_0 \lambda \approx 10^6 \text{ m/s} \quad (2.18)$$

Em (2.17) v_F é a velocidade de Fermi e notemos que a energia tem uma relação linear com o momento em contraste com o caso quadrático na formulação de Schrödinger¹¹. Uma forma alternativa para descrever os estados próximos da energia de Fermi é reescrever o hamiltoniano \mathcal{H} (eq. (2.12), matriz do centro) considerando a definição para \mathbf{k} vista anteriormente, fazendo uma expansão em potências de p até 1^a ordem, o resultado é,

$$\mathcal{H}_\pm = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

onde \pm está associado a escolha do ponto em que a expansão é feita, isto é, \mathbf{K}_+ ou \mathbf{K}_- . Usando o fato que $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e as matrizes de Pauli, dadas por,

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

satisfazendo,

$$\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta_{ij} \mathbf{1}, \quad \sigma^i \sigma^j = i\sigma^k, \quad (\sigma^i)^2 = \mathbf{1}, \quad \text{onde } i, j, k = x, y, z \quad (2.21)$$

¹¹Já estamos acostumados a ver $E = \frac{p^2}{2m}$ para partículas livres.

e $\mathbf{1}$ é a matriz identidade 2×2 , expressamos (2.19) como,

$$\mathcal{H}_+ = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x + ik_y \\ k_x - ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}), \text{ para a expansão em } \mathbf{K}_+ \quad (2.22)$$

$$\mathcal{H}_- = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k})^*, \text{ para a expansão em } \mathbf{K}_- \quad (2.23)$$

Nas eqs. (2.22) e (2.23), cada hamiltoniano atua como um operador de Dirac 2D com \mathbf{k} sendo o vetor de onda. Por outro lado o termo $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y)$ representa um *pseudospin*¹² devido termos duas sub-redes [31].

Em um problema de autovalores e autovetores $\mathcal{H}_\pm \Psi = E\Psi$, os autoestados associados aos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- são respectivamente expressos por,

$$\Psi_+ = \begin{pmatrix} \Psi_{+;A} \\ \Psi_{+;B} \end{pmatrix}, \Psi_- = \begin{pmatrix} \Psi_{-;A} \\ \Psi_{-;B} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

Podemos concluir que no limite de baixas energias (pequenos momentos), as excitações da rede são descritas pela teoria de dois espinores (2.24) 2D de Dirac, cujas componentes são funções de onda correspondentes às duas sub-redes (A e B) e aos dois pontos de Fermi (\mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_-). Neste limite, próximo aos pontos de Fermi a interação dos elétrons com o potencial periódico da rede simulam quasipartículas com velocidade da luz efetiva $v_F \approx \frac{c}{300}$ que faz o mesmo papel da velocidade da luz c . É devido aos pontos de Fermi que o grafeno se comporta como semi-metal, pois eles atuam como “pontos de fuga” entre as bandas de valência e condução, permitindo propriedades com alta mobilidade, por isso, os elétrons nos orbitais π são considerados livres [2]. Por fim, poderíamos também ter reescrito a equação $\mathcal{H}_\pm \Psi = E\Psi$ na forma matricial num espaço 4×4 (envolvendo simultaneamente a contribuição de ambas as redes) em seguida, usando $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ com $\hbar = 1 = v_F$ aquela equação matricial nos leva a $-i\alpha \cdot \nabla \Psi = E\Psi$ que descreve as quasipartículas como férmions de Dirac sem massa [4].

¹²Esse termo foi originalmente introduzido por Heisenberg para descrever a estrutura de núcleos atômicos como composto de neutrons e prótons (interpretados como estados quânticos da mesma partícula). Na perspectiva de Heisenberg, um pseudospin é uma superposição coerente de estados quânticos e descrito pelas matrizes de spin $1/2$ de pauli, $\boldsymbol{\sigma}$ [31, 32].

2.5 Grafeno com Defeitos Topológicos

Nesta seção faremos uma breve revisão sobre defeitos em estruturas cristalinas, mostrando a relação existente entre os defeitos no meio e as métricas de uma geometria não-euclidiana. Em seguida, abordaremos um tipo de defeito no grafeno chamado *desclinação* donde faremos uma análise geométrica usando a teoria elástica de defeitos e mostraremos que as desclinações estão relacionadas com os vetores de Frank. Por fim, introduziremos as desclinações via campos de gauge donde veremos a relação com o conhecido efeito Aharonov-Bohm.

2.5.1 Defeitos Topológicos em Cristais

Defeitos em estruturas cristalinas podem ser entendidos como as regiões nas quais o arranjo dos íons difere muito de um cristal perfeito. Tais defeitos são chamados *defeitos topológicos*, pois eles têm influência direta na topologia do cristal [3]. Em sólidos os defeitos só podem ser modelados se os considerarmos como cristais ideais, ou seja, a rede apresenta um arranjo atômico periódico perfeito. Sendo \mathbf{a}_i os vetores que constituem a base da rede ($a_i = 1$) a posição de um m -ésimo átomo numa rede 3D é dada por,

$$\mathbf{x}_m = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 \quad (2.25)$$

E sob a ação de forças externas assumindo que o cristal sofra deformações, a posição do m -ésimo átomo é transformada por,

$$\mathbf{x}_m \rightarrow \mathbf{x}'_m = \mathbf{x}_m + \mathbf{u}_m(x) \quad (2.26)$$

Por outro lado, tomando-se o limite do contínuo no cristal (parâmetro de rede $a \rightarrow 0$) pode-se considerar que as deformações no cristal são descritas por um *campo vetorial de deslocamento* cujas componentes são $u_i(x)$. Neste limite, temos que,

$$x'_i = x_i + u_i(x) \quad (2.27)$$

Logo a distância infinitesimal após uma deformação é,

$$dx'_i = dx_i + du_i \quad (2.28)$$

Donde obtemos que,

$$\begin{aligned} dx_i'^2 &= (dx_i + du_i)^2 \\ &= dx_i^2 + 2 \left\{ \frac{1}{2} (\partial_k u_i + \partial_i u_k + \partial_k u_l \partial_l u_i) \right\} dx_k dx_i \\ &= dx_i^2 + 2\epsilon_{ik} dx_k dx_i \end{aligned} \quad (2.29)$$

onde o termo,

$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2}(\partial_i u_k + \partial_k u_i + \partial_i u_l \partial_k u_l) \quad (2.30)$$

é chamado *tensor de deformação*. Na derivação de (2.29) usamos o fato que $du_i = \partial_k u_i dx_k$ e algumas propriedades da análise tensorial¹³. Notemos que ϵ_{ik} é simétrico pois $\epsilon_{ik} = \epsilon_{ki}$. Se as deformações forem pequenas então a contribuição do último termo em (2.30) pode ser desprezada de modo que teremos uma aproximação linear [35, 36],

$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2}(\partial_i u_k + \partial_k u_i) \quad (2.31)$$

Foram Katanaev e Volovich [37, 38] que fizeram a conexão entre a teoria das deformações elásticas e a geometria diferencial, propondo que a métrica no espaço euclidiano δ_{ik} e a métrica num espaço com torção e curvatura $g_{ik}(x)$ estão relacionadas por:

$$g_{ik}(x) = \partial_i x^l \partial_k x^m \delta_{lm} \approx \delta_{ik} - \partial_i u_k - \partial_k u_i = \delta_{ik} - 2\epsilon_{ik} \quad (2.32)$$

E automaticamente inferimos que,

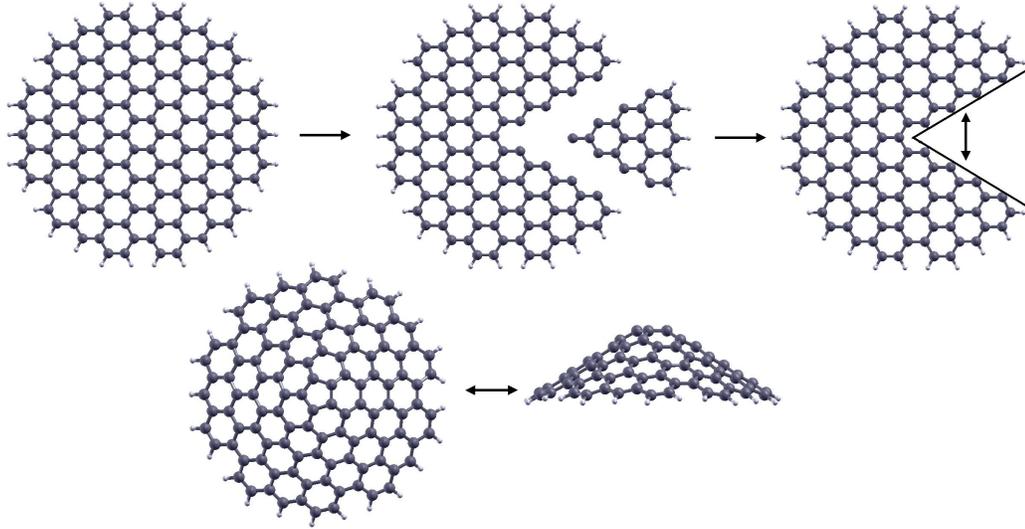
$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2}(\delta_{ik} - g_{ik}) \quad (2.33)$$

Vemos que a eq. (2.33) relaciona as deformações na rede e a métrica de um espaço não-euclidiano g_{ik} . Devemos observar que na ausência de deformações ($u_i = 0$) a métrica g_{ik} se torna idêntica ao tensor euclidiano δ_{ik} . Este resultado nos mostra que podemos descrever a influência dos defeitos no meio por meio de métricas de uma geometria com curvatura e torção [3]. Esta é uma geometria de Einstein-Cartan.

2.5.2 Defeitos Topológicos no Grafeno

Alterações locais na rede de grafeno são usualmente descritas por defeitos topológicos denominados *desclinações*, estes associadas às simetrias de rotação da rede cristalina. A classificação desses defeitos é feita por processos Volterra [39] que consiste num “processo de corte e colagem”: Dada uma superfície cristalina bidimensional, podemos retirar ou adicionar uma seção angular do material e ao unirmos as extremidades os resultados possíveis são uma superfície cônica (quando retiramos material) ou hiperbólica (quando adicionamos material). A figura 2.7 mostra esse processo para o caso de um defeito pentagonal consistindo na substituição de um hexágono, no ponto do defeito, por um pentágono ao retirarmos uma seção $\theta = \frac{\pi}{3}$ [4]. Se adicionássemos uma seção $\theta = \frac{\pi}{3}$, no ponto do defeito, teríamos a substituição

Figura 2.7: Processo de “corte e colagem” para o caso do defeito pentagonal.



Fonte: Referência [5].

de um hexágono por um heptágono. O 1^o caso, representa uma desclinação positiva já o 2^o caso exemplifica uma desclinação negativa.

Notemos que as desclinações provocam uma curvatura na folha de grafeno, distorcendo geometricamente a rede hexagonal. A medida dessa curvatura é dada, de acordo com a teoria elástica de defeitos, pelo vetor de Frank [3]. Esses defeitos chamados desclinações estão associados a estrutura de spin da rede.

Vamos agora fazer uma breve análise geométrica das desclinações usando a teoria elástica de defeitos. Começaremos então definindo um campo vetorial unitário $y^i(x)$, isto é $y^i y_i = 1$, definido em todos os pontos do meio. Por outro lado seja ω^{ik} o tensor que representa a estrutura de spin do meio e a partir dele podemos calcular o vetor de Frank dado por [38],

$$\Lambda_i = \epsilon_{ijk} \Omega^{jk} \quad (2.34)$$

onde,

$$\Omega^{ik} = \oint_C dx^\mu \partial_\mu \omega^{ik} \quad (2.35)$$

Notemos que ϵ_{ijk} é um tensor de 3^a ordem totalmente antisimétrico e a integral em (2.35) é tomada ao longo de um caminho fechado em torno do eixo da desclinação. A intensidade do vetor de Frank corresponde ao ângulo total de rotação do campo

¹³Para mais detalhes veja a referência [35].

y^i ao redor do eixo da desclinação [38]. Na presença de desclinações o campo $\omega^{ik}(x)$ não é suave, então pode-se considerar que pelo menos suas derivadas parciais o sejam de modo que definamos um novo campo tal que,

$$\omega_{\mu}^{ik} = \begin{cases} \partial_{\mu}\omega^{ik}, & \text{fora do ponto do defeito} \\ \lim \partial_{\mu}\omega^{ik}, & \text{no ponto do defeito} \end{cases}$$

Com isso, e usando o teorema de Stokes, podemos expressar o vetor de Frank como uma integral de superfície pois¹⁴,

$$\Omega^{ik} = \oint_C dx^{\mu} \omega_{\mu}^{ik} = \iint_S dx^{\mu} \wedge dx^{\nu} (\partial_{\mu}\omega_{\nu}^{ik} - \partial_{\nu}\omega_{\mu}^{ik}) \quad (2.36)$$

Onde S é uma superfície que tem o contorno C como fronteira. Na ausência de desclinação deve-se ter que,

$$\partial_{\mu}\omega_{\nu}^{ik} - \partial_{\nu}\omega_{\mu}^{ik} = 0 \quad (2.37)$$

E comparando o 1º membro de (2.37) com a expressão para o tensor de curvatura na geometria de Einstein-Cartan [34, 40, 41]:

$$R_{\mu\nu}{}^k{}_i = \partial_{\mu}\omega_{\nu i}{}^k - \omega_{\mu i}{}^l \omega_{\nu l}{}^k \quad (2.38)$$

Percebe-se que a diferença está apenas no 2º termo. E assim, como postulado por Katanaev e Volovich [37] o vetor de Frank pode ser expresso em termos do tensor de curvatura por,

$$\omega^{ik} = \iint_S dx^{\mu} \wedge dx^{\nu} R_{\mu\nu}{}^{ik} \quad (2.39)$$

Ou seja, o tensor de curvatura é interpretado fisicamente como a *densidade superficial* dos vetores de Frank.

Lembremos que defeitos topológicos em estruturas cristalinas influenciam diretamente na topologia do cristal, e devido a isso, o grafeno na presença de desclinações tem sua topologia alterada.

Desclinações e Campos de Gauge

Na teoria quântica de campos uma partícula de spin $1/2$ é descrita como um campo que pertence a um grupo de Lorentz de representações espinoriais. Esses espinores ao mover-se em torno de um caminho fechado, ganham uma fase de π (adquirem sinal menos) ao darem uma volta completa [43]. Tomando o caso do

¹⁴A expressão $dx^{\mu} \wedge dx^{\nu}$ é chamada produto ‘cunha’ entre as 1-formas, sendo definido por: $dx^{\mu} \wedge dx^{\nu} = \frac{1}{2}(dx^{\mu} \otimes dx^{\nu} - dx^{\nu} \otimes dx^{\mu})$.

defeito pentagonal mostrado na figura 2.7, um espinor que circunda um caminho fechado em torno do pentágono irá adquirir uma fase não trivial $\phi = 2\pi \left(1 - \frac{1}{6}\right)$ que é uma consequência de o elétron não poder percorrer um ângulo de 2π e na verdade esta fase é proporcional ao caminho angular percorrido. Este fato nos lembra o efeito Aharonov-Bohm que consiste em analisarmos o efeito de um campo magnético sobre a função de onda de um elétron ao mover-se num caminho fechado: observa-se que uma circulação completa produz um fator de fase proporcional ao fluxo magnético encerrado [4]. Com base nisso, a idéia então é substituir o pentágono por um campo magnético fictício localizado no mesmo ponto do defeito, e assim, pode-se ajustar o fluxo correspondente a este campo de modo que a fase adquirida pelo espinor seja exatamente a mesma daquela originada pelo defeito. Devemos ter que,

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi \left(1 - \frac{1}{6}\right) \quad (2.40)$$

O potencial vetor que satisfaz (2.40) é um do tipo vórtice [43]:

$$\mathbf{A}(x, y) = \frac{5\pi}{3} \left(-\frac{y}{x^2 + y^2}, \frac{x}{x^2 + y^2} \right) = -\frac{5\pi}{3} \nabla\theta(r) \quad (2.41)$$

onde vemos que em coordenadas polares reduz-se ao gradiente do ângulo polar θ . O procedimento acima descrito pode ser generalizado para o caso de defeitos cônicos com ângulo de abertura arbitrário λ . Agora a fase tem um fluxo:

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi \left(1 - \frac{\lambda}{2\pi}\right) \quad (2.42)$$

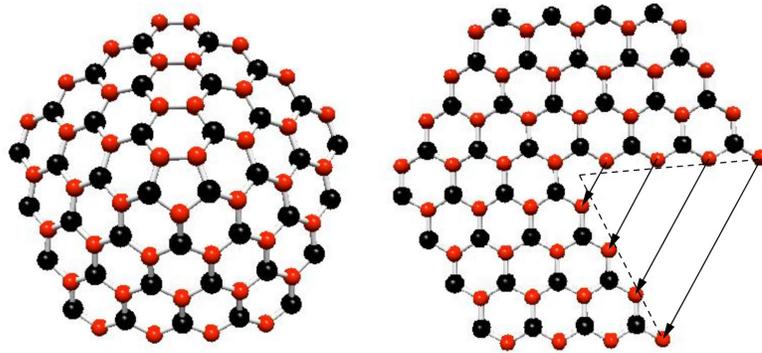
Devemos observar também que ao inserir uma desclinação, além de a curvatura na rede outra consequência ocorre: átomos da mesma sub-rede ficam conectados ao longo da linha de junção, obrigando os espinores a saltarem a sítios da mesma sub-rede, ou seja, misturando-os (ver figura 2.8).

Então a descrição dessa mistura é feita por um gauge não-Abeliano, dependente unicamente da topologia da rede, tal que [44]:

$$\oint_C A_\mu dx^\mu = \frac{\pi}{2} \tau_2 \quad (2.43)$$

onde τ_2 é uma das matrizes de Pauli cujo “papel” é misturar as componentes espinoriais associados aos pontos de Fermi \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- (lembramos que $\mathbf{K}_+ = -\mathbf{K}_-$). Um outro tipo de campo de gauge é introduzido devido a presença de vários defeitos, contudo, não faz parte do escopo desta dissertação abordá-lo e indicamos a referência [43] para um estudo detalhado sobre o tema.

Figura 2.8: Conexão de átomos de mesma sub-rede.



Fonte: Referência [43]

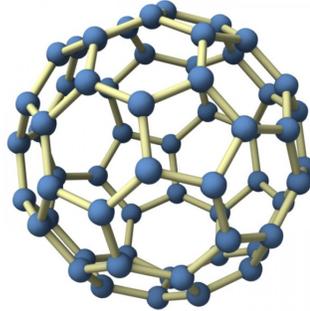
2.6 A Molécula de Fulereno

2.6.1 Introdução

Fulerenos são alótropos do carbono que tem por convenção dimensão zero, pois são moléculas enroladas como uma bola de futebol. Uma classe interessante é o fulereno C_{60} (apelidado de ‘bucky ball’) cuja descoberta em 1985 se deve a Kroto, Curl, Smalley *et al.*, que estavam motivados a compreender os mecanismos para a formação de longas cadeias de carbono no espaço interestelar. A técnica usada para a produção e detecção da molécula, envolveu a vaporização do carbono por irradiação laser a partir de uma superfície de grafite [15]. Os átomos de carbono do fulereno C_{60} localizam-se nos vértices de um icosaedro truncado (ver fig. 2.9), um polígono que possui 60 vértices e 32 faces, sendo 12 pentagonais e 20 hexagonais. Outras moléculas maiores podem ser sintetizadas a partir do C_{60} , tais como C_{240} e C_{540} segundo a descrição feita em [28]. Uma descrição detalhada sobre as propriedades do fulereno pode ser encontrada em [73]-[76].

A molécula de fulereno pode ser descrita por um modelo *tight-binding* [28, 45]. Neste modelo, a superfície de Fermi se reduz a apenas dois pontos (os \mathbf{K} -pontos), localizados na primeira ZB [30, 43, 72], onde os portadores de carga (elétrons) são descritos por uma equação de Dirac efetiva para férmions sem massa, tal como vimos no caso do grafeno em 2.4.

A seguir, faremos uma breve revisão do primeiro modelo contínuo geométrico para o fulereno, proposto por Gonzalez, Guinea e Vozmediano [28, 45].

Figura 2.9: Fulereo C_{60} com os átomos de carbono em destaque.

Fonte: Google

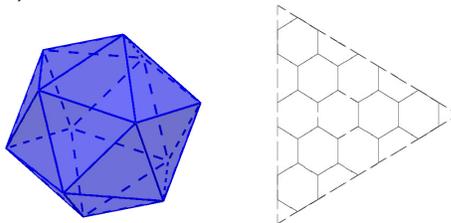
2.6.2 O Espectro Eletrônico do Fulereo

Para obter o espectro eletrônico do fulereo, considerando a simetria esférica de tal sistema, Gonzalez, Guinea e Vozmediano propuseram em [28], um modelo que consistia em resolver a equação de Dirac sobre a superfície de uma esfera com um monopolo magnético (fictício) em seu centro. Esta esfera deve conter a curvatura intrínseca da rede acumulada nos pentágonos. Por outro lado, a carga do monopolo fictício g é computada adicionando os fluxos sobre as singularidades cônicas (defeitos) na superfície,

$$g = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \frac{\pi}{2} = \frac{N}{8} \quad (2.44)$$

sendo N o número de defeitos na superfície. No caso particular da rede favo-de-mel inscrita no icosaedro¹⁵ (ver fig. 2.10), os defeitos pentagonais são descritos pelos vértices [28], então $N = 12 \rightarrow g = \frac{3}{2}$.

Figura 2.10: Icosaedro (a). Face do icosaedro com rede favo-de-mel inscrita (b).



Fonte: Referência [28] (para (b))

¹⁵Um poliedro convexo de 20 faces. Se as faces de um icosaedro são triângulos equiláteros e congruentes entre si, o mesmo é denominado convexo regular. É também um dos sólidos platônicos (veja [3] para detalhes.).

O parâmetro $\frac{\pi}{2}$ fornece a fase não-Abeliana adquirida pelo dubleto de spinores ao contornar a singularidade cônica [28]. Uma vez que neste sistema temos spinores bidimensionais, o ‘papel’ das matrizes de Dirac agora pertence às matrizes de Pauli [68] e portanto a equação de Dirac efetiva toma a forma [43],

$$i\sigma^a e^\mu_a (\nabla_\mu - iA_\mu)\Phi_n = \varepsilon_n \Phi_n, \quad a, \mu = 1, 2 \quad (2.45)$$

onde e^μ_a são os campos de tetrada inversa sobre a esfera, A_μ é o campo de gauge não-Abeliano que simula o monopolo fictício no centro da esfera e em coordenadas esféricas temos,

$$\nabla_\theta = \partial_\theta, \quad \nabla_\phi = \partial_\phi - \frac{1}{4}[\sigma^1, \sigma^2] \cos \theta, \quad (2.46)$$

$$A_\theta = 0, \quad A_\phi = g \cos \theta \tau^{(2)} \quad (2.47)$$

O operador de Dirac pode ser diagonalizado através da introdução de operadores momento angular, que são dados, para a componente do spinor Φ_\uparrow ,

$$J_\pm = \pm e^{\pm i\phi} \nabla_\theta + i e^{\pm i\phi} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} (\nabla_\phi - i g \cos \theta \tau^{(2)}) - e^{\pm i\phi} \sin \theta \left(-\frac{1}{2} - g \tau^{(2)} \right) \quad (2.48)$$

$$J_z = -i (\nabla_\phi - i g \cos \theta \tau^{(2)}) - \cos \theta \left(-\frac{1}{2} - g \tau^{(2)} \right) \quad (2.49)$$

para a componente Φ_\downarrow os operadores são similares, com a mudança no sinal das frações $\frac{1}{2}$ [28]. Então usando o fato que $\mathbf{J}^2 \Phi_n = j(j+1) \Phi_n$ e $\mathbf{J}^2 = J_z^2 \mp J_z + J_\pm J_\mp$ com algum trabalho algébrico, mostra-se que cada componente do spinor, com seus respectivos operadores momento angular, obedece a equação,

$$\left(\mathbf{J}^2 - g^2 + \frac{1}{4} \right) \Phi_n = \varepsilon_n^2 r^2 \Phi_n \quad (2.50)$$

onde r é o raio da esfera. Então, resolvendo o problema de autovalores (2.50), obtemos,

$$\varepsilon_j = \pm \frac{1}{r} \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - g^2} \quad \text{com } j \in \mathbb{Z} \quad (2.51)$$

Capítulo 3

Não-Comutatividade e Esfera Fuzzy

Neste capítulo faremos uma revisão do modelo de Landau relativístico, onde veremos os autovalores, autoestados e algumas propriedades do operador Dirac-Landau. Em seguida, veremos como a geometria não-comutativa se manifesta em níveis de Landau relativísticos como uma consequência da projeção de nível, sendo esta última usada para gerar geometrias fuzzy, isto é, introduzir as esferas fuzzy neste caso. Por último, faremos uma abordagem do modelo de Landau relativístico e esferas fuzzy sob deformação da massa, onde veremos a influência do parâmetro de massa M no espectro e nos autoestados do operador Dirac-Landau massivo, além disso, mostraremos como os tamanhos das esferas fuzzy são alterados devido a presença do parâmetro de massa.

3.1 Modelo de Landau Relativístico sobre uma Esfera

Modelos de Landau relativísticos sobre uma esfera tem grande relevância no estudo de materiais de Dirac como grafeno e isolantes topológicos¹ (veja [28] e [45]-[49], por exemplo). Faremos uma análise do modelo de Landau relativístico sobre uma esfera por meio de métodos algébricos e veremos que isto nos fornece

¹Isolantes topológicos são materiais que são isolantes em seu interior mas podem suportar o fluxo de elétrons sobre sua superfície. Uma das causas disso é a simetria por reversão temporal: sua física é independente se o tempo flui para frente ou para trás. Tais estados de superfície mantêm-se mesmo na presença de defeitos topológicos.

uma maneira sucinta de resolver o operador Dirac-Landau, sendo este último o que descreve o modelo .

3.1.1 Operador Momento Angular SU(2) e a Conexão de Spin

Usando coordenadas locais $\mu = \theta, \phi$ a métrica da 2-esfera (S^2) é expressa como,

$$ds^2 = d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (3.1)$$

e podemos introduzir uma base dual 1-forma apropriada² definida por $e^a = e^a_\mu dx^\mu$, onde,

$$e^1 = d\theta, \quad e^2 = \sin \theta d\phi \quad (3.2)$$

A métrica e os campos de tetradas estão relacionados por,

$$ds^2 = \delta_{mn} e^m_\mu e^n_\nu dx^\mu dx^\nu \quad (3.3)$$

vale ressaltar também que $e^m_\mu e^m_\nu = \delta^\nu_\mu$ e $e^m_\mu e^n_\mu = \delta^n_m$.

Podemos utilizar a 1ª das equações de estrutura de Maurer-Cartan [40, 41, 42], sem torsão, dada por,

$$de^a + \omega_{ab} \wedge e^b = 0 \quad (3.4)$$

para obtermos as conexões de spin, temos,

$$\omega_{12} = -\omega_{21} = -\cos \theta d\phi \quad (3.5)$$

Pretendemos agora obter a matriz de conexão de spin ω e para tanto vamos escolher as matrizes gama $SO(2)$ e os geradores de rotação para campos de spin $1/2$ como [7],

$$\begin{aligned} \gamma^1 &= \sigma_x, & \gamma^2 &= \sigma_y, \\ \sigma^{ab} &= -\sigma^{ba} = -i \frac{1}{4} [\gamma^a, \gamma^b] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Donde obtemos que,

$$\sigma^{12} = -\sigma^{21} = -i \frac{1}{4} [\gamma^1, \gamma^2] = \frac{1}{2} \sigma_z$$

onde σ_i com $i = x, y, z$ são as matrizes de Pauli que obedem as regras de comutação do grupo $SU(2)$ $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, onde ε_{ijk} é o tensor de Levi-Civita. A matriz de conexão de spin é dada por,

$$\omega = \frac{1}{2} \omega_{ab} \sigma^{ab} \quad (3.7)$$

²As tetradas e^a_μ (e_a^μ para a inversa) são elementos que conectam o referencial local e o arbitrário. Aqui as letras latinas (a, b, \dots) representam as coordenadas do espaço euclidiano d -dimensional enquanto as gregas (μ, ν, \dots) indicam as coordenadas intrínsecas da variedade que estamos trabalhando.

e notando que $\omega_{11} = \omega_{22} = 0$ usando as eqs. (3.5) e (3.7) chegamos a,

$$\omega = -\frac{1}{2}\sigma_z \cos \theta d\phi \quad (3.8)$$

As componentes do operador Dirac-Landau são definidas em termos da conexão de spin como,

$$-i\mathcal{D}_\mu = -i\partial_\mu - \mathcal{A}_\mu \quad (3.9)$$

onde,

$$\mathcal{A}_\mu = -\omega_\mu \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes A_\mu \quad (3.10)$$

Fazendo $\mu = \theta, \phi$ vemos que $\mathcal{A}_\theta = 0$, por outro lado pela eq. (3.8),

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\phi &= -\left(-\frac{1}{2}\sigma_z \cos \theta\right) \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes (-g \cos \theta) \\ &= -g_s \cos \theta \end{aligned}$$

E então destacamos a matriz do campo de gauge,

$$\mathcal{A} = -g_s \cos \theta d\phi \quad \text{com} \quad g_s = g - \frac{1}{2}\sigma_z \quad (3.11)$$

Das eqs. (3.9) e (3.11) tiramos que,

$$-i\mathcal{D}_\theta = -i\partial_\theta, \quad -i\mathcal{D}_\phi = -i\partial_\phi + g_s \cos \theta \quad (3.12)$$

O campo de força associado a \mathcal{A} é obtido a partir de,

$$\mathcal{F}_{\theta\phi} = -i[\mathcal{D}_\theta, \mathcal{D}_\phi] \quad (3.13)$$

e realizando um procedimento análogo aquele do apêndice A considerando uma função teste $f(\theta, \phi)$, devemos ter,

$$\mathcal{F}_{\theta\phi} = g_s \sin \theta \quad (3.14)$$

ou em coordenadas cartesianas,

$$\mathcal{F}_j = g_s \frac{1}{r^3} x_j \quad (3.15)$$

Segundo Kazuki Hasebe [7], o operador momento angular total associado ao sistema é,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}^{(g_s)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(g-\frac{1}{2})} & 0 \\ 0 & \mathbf{L}^{(g+\frac{1}{2})} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

ou se fizermos a troca $g \rightarrow g_s$ nas expressões (A.21-A.23) obtemos as componentes do momento angular total no caso relativístico:

$$\begin{aligned} J_x &= i(\text{sen } \phi \mathcal{D}_\theta + \cos \phi \cot \theta \mathcal{D}_\phi) - g_s \frac{x}{r} \\ &= i(\text{sen } \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) - g_s \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} J_y &= -i(\cos \phi \mathcal{D}_\theta - \text{sen } \phi \cot \theta \mathcal{D}_\phi) - g_s \frac{y}{r} \\ &= -i(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \text{sen } \phi \partial_\phi) - g_s \frac{\text{sen } \phi}{\text{sen } \theta} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$J_z = -i\mathcal{D}_\phi - g_s \frac{z}{r} = -i\partial_\phi \quad (3.19)$$

que satisfazem,

$$[J_j, J_k] = i\varepsilon_{jkl} J_l \quad (3.20)$$

Usando as eqs.(3.17-3.19) e fazendo um cálculo análogo ao caso não-relativístico (veja apêndice A), obtemos o quadrado do operador momento angular total (ou Casimir $SU(2)$), em coordenadas esféricas,

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^{(0)2} - 2ig_s \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + g_s^2 \frac{1}{\text{sen}^2 \theta} \quad (3.21)$$

onde $\mathbf{L}^{(0)2}$ é dado pela eq.(A.27). Da eq.(3.11) podemos reescrever \mathbf{J}^2 como,

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^{(0)2} - 2ig \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi + \frac{1}{4\text{sen}^2 \theta} (1 + 4g^2) + i \frac{\sigma_z}{\text{sen}^2 \theta} (\cos \theta \partial_\phi + ig) \quad (3.22)$$

Pode-se mostrar sem dificuldade que \mathbf{J} comuta com a matriz quiral σ_z :

$$[\sigma_z, \mathbf{J}] = 0 \quad (3.23)$$

Como devemos esperar, os autovalores de \mathbf{J}^2 são dados por,

$$j(j+1) \quad (3.24)$$

onde j é obtido por³,

$$j = g + n - \frac{1}{2} \quad \text{com} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

No nível mais baixo ($n = 0$), temos $j = g - \frac{1}{2}$, cujos autoestados são,

$$\Upsilon_{j=g-\frac{1}{2}, m}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j=g-\frac{1}{2}, m}^{g-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

³A eq.(3.25) é válida para $g \neq 0$. Se $g = 0$ então $j = \frac{1}{2} + n$ onde $n = 0, 1, 2, \dots$

com degenerescência (valores possíveis de m) $2j + 1 = 2 \cdot (g - \frac{1}{2}) + 1 = 2g$. Por outro lado para $n \neq 0$ os autoestados correspondentes são,

$$\Upsilon_{j=g+n-\frac{1}{2},m}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j=g+n-\frac{1}{2},m}^{g-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Upsilon_{j=g+n-\frac{1}{2},m}^g = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{Y}_{j=g+n-\frac{1}{2},m}^{g+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

mas agora a degenerescência é $2 \cdot (2j + 1) = 2 \cdot [2(g + n - \frac{1}{2}) + 1] = 4(g + n)$.

3.1.2 O Problema de Autovalores para $-i\mathcal{D}$

Usando a eq. (3.12) podemos determinar o operador Dirac-Landau, expresso em termos dos campos de tetrada inversa e as matrizes gama como,

$$-i\mathcal{D} = -ie_a^\mu \gamma^a \mathcal{D}_\mu \quad (3.28)$$

mas das eqs. (3.1) e (3.2) obtemos,

$$e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \text{sen } \theta \end{pmatrix} \text{ com inversa } e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}^{-1} \theta \end{pmatrix}, \quad a = 1, 2; \mu = \theta, \phi \quad (3.29)$$

e uma vez que $\gamma^1 = \sigma_x$ e $\gamma^2 = \sigma_y$ reescrevemos (3.28),

$$-i\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_\theta - \frac{1}{\text{sen } \theta} [\partial_\phi + i(g + \frac{1}{2}) \cos \theta] \\ -i\partial_\theta + \frac{1}{\text{sen } \theta} [\partial_\phi + i(g - \frac{1}{2}) \cos \theta] & 0 \end{pmatrix}$$

Agora usando as expressões para os operadores edth (A.49), vemos que,

$$-i\partial_\theta \mp \frac{1}{\text{sen } \theta} [\partial_\phi + i(g \pm \frac{1}{2}) \cos \theta] = -i\tilde{\partial}_\mp^{(g \pm \frac{1}{2})} \quad (3.30)$$

e assim o operador Dirac-Landau toma a forma,

$$-i\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & -i\tilde{\partial}_-^{(g+\frac{1}{2})} \\ -i\tilde{\partial}_+^{(g-\frac{1}{2})} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

A diferença por 1 unidade na carga do monopolo nos termos fora da diagonal é uma consequência do termo de conexão de spin contido em \mathcal{D}_μ .

A obtenção do espectro do operador Dirac-Landau sobre a variedade S^2 foi discutida com detalhes em [7, 48, 60]. A ideia então é calcularmos o espectro de $(-i\mathcal{D})^2$ e a partir deste último obter os autovalores de $-i\mathcal{D}$. Da eq. (3.31) facilmente obtemos,

$$(-i\mathcal{D})^2 = - \begin{pmatrix} \tilde{\partial}_-^{(g+\frac{1}{2})} \tilde{\partial}_+^{(g-\frac{1}{2})} & 0 \\ 0 & \tilde{\partial}_+^{(g-\frac{1}{2})} \tilde{\partial}_-^{(g+\frac{1}{2})} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

mas a partir das eqs. (A.51) e (A.52) podemos mostrar que,

$$-\partial_{\pm}^{(g\mp\frac{1}{2})}\partial_{\mp}^{(g\pm\frac{1}{2})} = \mathbf{L}^{(g\pm\frac{1}{2})^2} - g^2 + \frac{1}{4} \quad (3.33)$$

Das eqs. (3.33) reescrevemos (3.32) como,

$$(-i\mathcal{D})^2 = \mathbf{J}^2 - g^2 + \frac{1}{4} \quad (3.34)$$

onde usamos a definição (3.16). A eq. (3.34) satisfaz a forma geral [7, 48, 60],

$$(-i\mathcal{D})^2 = \mathbf{J}^2 - g^2 + \frac{\mathcal{R}}{8} \quad (3.35)$$

onde identificamos imediatamente que $\mathcal{R} = 2$ (escalar de Ricci para S^2).

Uma vez que conhecemos os autovalores de \mathbf{J}^2 (3.24), vemos que o espectro de $(-i\mathcal{D})^2$ é dado por,

$$(-i\mathcal{D})^2 = j(j+1) - g^2 + \frac{1}{4} = n(2g+n) \quad (3.36)$$

onde usamos (3.25). Portanto, os autovalores do operador Dirac-Landau, a partir de (3.36) são calculados por,

$$\pm\kappa_n = \pm\sqrt{n(2g+n)}, \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.37)$$

Os autoestados de $(-i\mathcal{D})^2$ são idênticos aos de \mathbf{J}^2 , dado pelas eqs. (3.26) e (3.27).

Outra propriedade interessante do operador Dirac-Landau é que ele é invariante sob transformações $SU(2)$, ou seja,

$$[\mathbf{J}, \mathcal{D}] = 0 \quad (3.38)$$

Para verificar isto, pode-se usar as eqs. (3.16) e (3.31). É trivial também verificar que $-i\mathcal{D}$ respeita a ‘simetria’ quiral:

$$\{-i\mathcal{D}, \sigma_z\} = 0 \quad (3.39)$$

apesar de não comutar com a matriz quiral,

$$[-i\mathcal{D}, \sigma_z] \neq 0 \quad (3.40)$$

O fato de o operador Dirac-Landau ser invariante sob transformações $SU(2)$ (3.38) implica que os níveis de Landau relativísticos têm a degenerescência $SU(2)$, e além disso, seus autoestados podem ser construídos como uma combinação linear dos autoestados de \mathbf{J}^2 , isto é, $\Upsilon_{j,m}^{g'}$ e $\Upsilon_{j,m}^g$. Por outro lado, por respeitar a ‘simetria’ quiral (3.39) seus autoestados para autovalores de sinais opostos deverão estar relacionados pela transformação quiral, exceto para modos-zero⁴, como veremos mais adiante. Por último, uma vez que o operador Dirac-Landau não comuta com a matriz quiral (3.40), vale ressaltar que ambos não possuem autoestados simultâneos, com exceção dos modos-zero.

⁴Modos-zero são autoestados cujos autovalores são nulos.

Autoestados para $n = 0$ (modos-zero)

Para $n = 0$, as eqs. (3.25) e (3.37) nos dizem que,

$$\kappa_{n=0} = 0, \quad j = g - \frac{1}{2} \quad (3.41)$$

e os autoestados correspondentes são dados por,

$$\Psi_{\kappa_{n=0},m}^g(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{g-\frac{1}{2},m}^{g-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad m = -g + \frac{1}{2}, \dots, g - \frac{1}{2} \quad (3.42)$$

onde $\mathcal{Y}_{g-\frac{1}{2},m}^{g-\frac{1}{2}}(\theta, \phi)$ são os harmônicos monopulares do nível mais baixo de Landau ($n = 0$) com $g \rightarrow g - \frac{1}{2}$ (consulte apêndice A). Note que os modos-zero (3.42) são idênticos aos autoestados de \mathbf{J}^2 para o nível mais baixo de Landau (3.26), com mesma degenerescência, ou seja, $2g$. A eq. (3.42) é válida apenas para $g > 0$. Se $g < 0$, os autoestados são dados por [7],

$$\Psi_{\kappa_{n=0},m}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{Y}_{|g|-\frac{1}{2},m}^{-|g|+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

A degenerescência dos modos-zero também pode ser obtida via teorema do índice,⁵ e neste caso precisamos calcular o 1º número de Chern, temos,

$$c_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{S^2} F = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} g \sin \theta d\theta d\phi = 2g \quad (3.44)$$

onde usamos (A.7).

Autoestados para $n \neq 0$ (modos não-zeros)

Os autoestados do operador $-i\mathcal{D}$ são obtidos pela combinação linear de $\Upsilon_{j,m}^{\prime g}(\theta, \phi)$ e $\Upsilon_{j,m}^g(\theta, \phi)$ com autovalores dados por (3.37). A combinação linear é da forma,

$$\Psi_{\pm\kappa_n,m}^g(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Upsilon_{j,m}^{\prime g}(\theta, \phi) \mp i\Upsilon_{j,m}^g(\theta, \phi)] \quad (3.45)$$

ou usando as eqs.(3.27) obtemos, na forma matricial,

$$\Psi_{\pm\kappa_n,m}^g(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ \mp i\mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

⁵O teorema do índice diz que o número de modos-zero é igual a carga topológica da configuração de gauge não-trivial: $Ind(-i\mathcal{D}) = c_k$ onde c_k é o k -ésimo número de Chern do monopolo $SO(2k)$ [48].

onde como sabemos,

$$j = g + n - \frac{1}{2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad \text{e} \quad m = -j, \dots, j \quad (3.47)$$

Para mostrar que de fato $\Psi_{\pm\kappa_n, m}^g$ são autoestados do operador Dirac-Landau, pode-se usar as eqs. (3.27) e (3.31).

A eq. (3.47) nos permite fazer uma observação importante: quando g é um inteiro (semi-inteiro), j e m automaticamente são semi-inteiros (inteiros). Enquanto que no caso não-relativístico eqs. (A.31) e (A.32), se g for inteiro (semi-inteiro) ℓ e m são inteiros (semi-inteiros). Notemos também que a degenerescência dos níveis de Landau relativísticos $\pm\kappa_n$ é dada pelos valores possíveis de m , isto é,

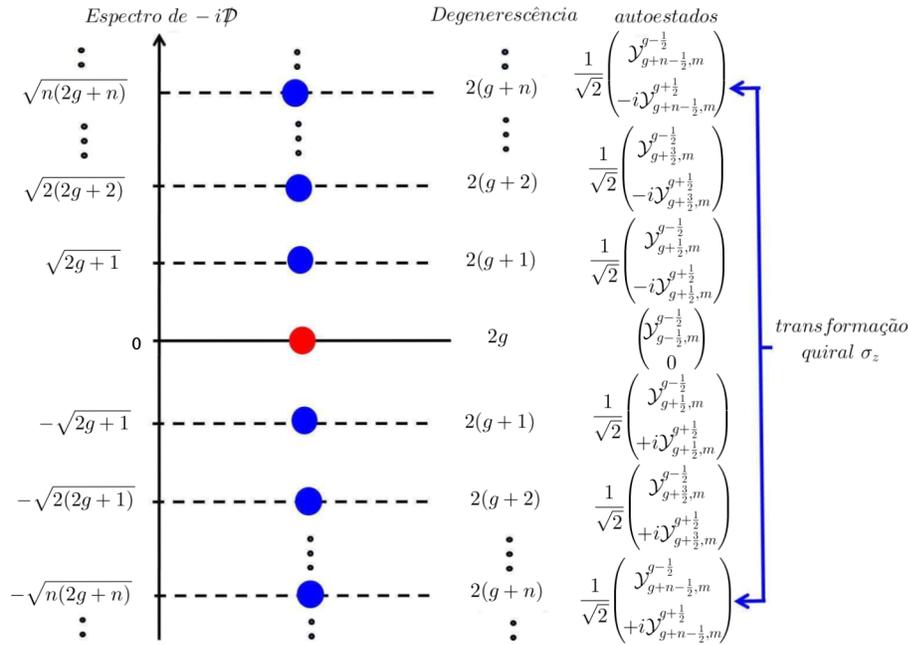
$$2j + 1 = 2 \left(g + n - \frac{1}{2} \right) + 1 = 2(g + n) \quad (3.48)$$

Não é difícil mostrar que os autoestados $\Psi_{+\kappa_n, m}^g$ e $\Psi_{-\kappa_n, m}^g$ estão relacionados pela transformação quiral como,

$$\Psi_{\mp\kappa_n, m}^g = \sigma_z \Psi_{\pm\kappa_n, m}^g \quad (3.49)$$

que é uma consequência do operador $-i\mathcal{D}$ obedecer a ‘simetria’ quiral (3.39). Note que (3.49) relaciona autoestados com autovalores de sinais opostos. A figura 3.1 mostra de maneira resumida o espectro, as degenerescências e os autoestados do operador Dirac-Landau.

Figura 3.1: Autovalores, autoestados, degenerescência do operador Dirac-Landau e a relação entre autoestados com autovalores de sinais opostos pela transformação quiral.



Fonte: Referência [7]

3.2 Geometria Não-Comutativa e a Projeção de Nível

A geometria não-comutativa é uma estrutura matemática muito utilizada na descrição do espaço-tempo por exemplo, e na física de partículas tem aplicações no modelo padrão não-comutativo e na teoria quântica de campos não-comutativa. Na física de baixas energias de alguns materiais reais a geometria não-comutativa aparece naturalmente [61]. Mostraremos nesta seção que na concepção dos níveis de Landau, a geometria não-comutativa manifesta-se como uma consequência da projeção de nível. Em seguida usaremos a projeção de nível como uma ferramenta para gerarmos geometrias fuzzy.

3.2.1 Projeção do Nível de Landau e Geometria Não-Comutativa

Resolvendo a equação de Schrödinger para o hamiltoniano de Landau (A.43) obtemos um espaço de Hilbert infinito gerado pelos harmônicos monopulares. Admitindo que este espaço seja bem definido, no contexto da projeção de nível podemos considerá-lo como sendo formado por um conjunto de subespaços, sendo estes últimos com dimensão finita e indexados pelo índice do nível de Landau. Na base formada pelos harmônicos monopulares podemos representar qualquer operador na forma matricial, bastando para isso “sanduichá-lo”, por exemplo, as coordenadas cartesianas podem ser representadas matricialmente como,

$$x_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & X_j(n-1, n) & 0 & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & X_j(n, n-1) & X_j(n, n) & X_j(n, n+1) & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & X_j(n+1, n) & 0 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

onde $X_j(n_1, n_2)$ são operadores coordenadas. Em (3.50) os X_j são matrizes bloco $(2g + 2n_1 + 1) \times (2g + 2n_2 + 1)$ entre os n_1 e n_2 é-simos níveis de Landau [7].

Nosso objetivo é obter a álgebra $SU(2)$ da esfera fuzzy e para tanto usaremos o fato que as coordenadas cartesianas usuais comutam,

$$x_j x_k = x_k x_j \quad (3.51)$$

então considerando apenas o n -ésimo bloco do nível de Landau interno no produto (3.51) temos,

$$\begin{aligned} x_j x_k(n, n) &= X_j(n, n-1) X_k(n-1, n) \\ &\quad + X_j(n, n) X_k(n, n) + X_j(n, n+1) X_k(n+1, n) \end{aligned} \quad (3.52)$$

por outro lado,

$$\begin{aligned} x_k x_j(n, n) &= X_k(n, n-1) X_j(n-1, n) \\ &\quad + X_k(n, n) X_j(n, n) + X_k(n, n+1) X_j(n+1, n) \end{aligned} \quad (3.53)$$

substituindo (3.52) e (3.53) em (3.51), obtemos,

$$\begin{aligned} X_j(n, n) X_k(n, n) - X_k(n, n) X_j(n, n) &= -[X_j(n, n-1), X_k(n-1, n)] \\ &\quad - [X_j(n+1, n), X_k(n, n+1)] \end{aligned} \quad (3.54)$$

De (3.54), temos,

$$[X_j(n, n), X_k(n, n)] = -[X_j(n, n-1), X_k(n-1, n)] \\ - [X_j(n+1, n), X_k(n, n+1)] \quad (3.55)$$

A soma dos comutadores no lado direito de (3.55) resulta numa matriz bloco do nível de Landau interno, isto é,

$$-[X_j(n, n-1), X_k(n-1, n)] - [X_j(n+1, n), X_k(n, n+1)] = -i\tau_n^{(g)} \varepsilon_{jkl} X_l(n, n) \quad (3.56)$$

onde $\tau_n^{(g)}$ é um fator de proporcionalidade que será identificado mais adiante. Então comparando (3.55) e (3.56) tiramos que,

$$[X_j(n, n), X_k(n, n)] = -i\tau_n^{(g)} \varepsilon_{jkl} X_l(n, n) \quad (3.57)$$

A eq. (3.57) é a álgebra $SU(2)$ da esfera fuzzy [62, 63, 64]. A manifestação desta álgebra é devida a projeção de nível, em que consideramos apenas um subespaço (os blocos de matrizes do nível de Landau interno) do espaço de Hilbert, isto por que, existem elementos de matrizes fora da diagonal que não são nulos. Tais elementos são os que representam a geometria não-comutativa neste contexto.

3.2.2 Projeção para Níveis de Landau Não-Relativísticos

Vamos introduzir com detalhes o aparecimento da geometria fuzzy, tendo por base a projeção de nível como principal ferramenta para tal realização. Então com o uso dos teoremas 1 e 3 da Ref. [65], pode-se mostrar que na base dos harmônicos monopulares os elementos de matriz das coordenadas (3.50) são explicitamente dados por [7],

$$\langle \mathcal{Y}_{\ell', m'}^g | \frac{1}{r} (x \pm iy) | \mathcal{Y}_{\ell, m}^g \rangle = \frac{g}{\ell(\ell+1)} \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} \delta_{\ell', \ell} \delta_{m', m \pm 1} \\ \pm \frac{1}{\ell+1} \sqrt{\frac{[(\ell+1)^2 - g^2](\ell \pm m + 2)(\ell \pm m + 1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \delta_{\ell', \ell+1} \delta_{m', m \pm 1} \\ \mp \frac{1}{\ell} \sqrt{\frac{(\ell^2 - g^2)(\ell \mp m)(\ell \mp m - 1)}{(2\ell-1)(2\ell+1)}} \delta_{\ell', \ell-1} \delta_{m', m \pm 1} \quad (3.58)$$

$$\langle \mathcal{Y}_{\ell', m'}^g | \frac{1}{r} z | \mathcal{Y}_{\ell, m}^g \rangle = \frac{g}{\ell(\ell+1)} m \delta_{\ell', \ell} \delta_{m', m} \\ - \frac{\ell}{\ell+1} \sqrt{\frac{[(\ell+1)^2 - g^2][(\ell+1)^2 - m^2]}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \delta_{\ell', \ell+1} \delta_{m', m} \\ + \frac{1}{\ell} \sqrt{\frac{(\ell^2 - g^2)(\ell^2 - m^2)}{(2\ell-1)(2\ell+1)}} \delta_{\ell', \ell-1} \delta_{m', m} \quad (3.59)$$

Da eq. (A.31) vemos que nas eqs. (3.58) e (3.59) $\ell = g + n$ e $\ell' = g + n'$, por outro lado, os primeiros termos representam os elementos das matrizes bloco dos níveis de Landau internos $X_j(n, n)$ enquanto que os outros dois termos indicam os elementos das matrizes bloco dos níveis fora da diagonal porém adjacentes aos internos $X_j(n_1, n_2)$ com $|n_1 - n_2| = 1$. No limite de $g \gg n$ (chamado limite não-comutativo) os blocos de matrizes dos níveis de Landau adjacentes $X_j(n_1, n_2)$ tornam-se desprezíveis comparados aos blocos de matrizes dos níveis de Landau internos $X_j(n, n)$. Podemos representar os elementos de matriz dos níveis de Landau internos como,

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(n, n)_{m', m} &= \langle \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g | \mathbf{x} | \mathcal{Y}_{\ell, m}^g \rangle \\ &= -r \frac{g}{(g+n)(g+n+1)} \langle \mathcal{Y}_{g+n, m'}^g | \mathbf{L}^{(g)} | \mathcal{Y}_{g+n, m}^g \rangle \\ &= -\tau_n^{(g)} \mathbf{S}_{s=g+n} \end{aligned} \quad (3.60)$$

onde,

$$\tau_n^{(g)} \equiv r \frac{g}{(g+n)(g+n+1)} \quad \text{e} \quad \mathbf{S}_{s=g+n} \equiv \langle \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g | \mathbf{L}^{(g)} | \mathcal{Y}_{\ell, m}^g \rangle \quad (3.61)$$

e $\mathbf{S}_{s=g+n}$ representa matrizes $(2s+1) \times (2s+1)$ do grupo $SU(2)$, com magnitude de spin⁶ $s = g + n$.

A eq. (3.60) nos permite introduzir a geometria fuzzy onde determinaremos o raio da esfera fuzzy a partir do seu quadrado, obtido por,

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(n, n) \cdot \mathbf{X}(n, n) &= \tau_n^{(g)2} \langle \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g | \mathbf{L}^{(g)2} | \mathcal{Y}_{\ell, m}^g \rangle \\ &= \tau_n^{(g)2} (g+n)(g+n+1) \equiv \mathcal{R}_n^{(g)2} \end{aligned} \quad (3.62)$$

Assim, das eqs. (3.61) e (3.62), obtemos,

$$\mathcal{R}_n^{(g)} = r \frac{g}{\sqrt{(g+n)(g+n+1)}}, \quad \text{onde} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.63)$$

Vemos que o raio da esfera fuzzy tem dependência com o índice do nível de Landau.

Podemos entender, de outro modo, o aparecimento da esfera fuzzy mostrando que no limite não-comutativo o operador \mathbf{x} corresponde a $-\frac{r}{g} \mathbf{L}^{(g)}$ onde este último satisfaz a álgebra da esfera fuzzy (3.57). Partiremos da eq. (A.20), onde representamos os elementos de matriz do momento angular covariante na base dos harmônicos monoplares, no n -ésimo nível de Landau, temos,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}_{\ell, m}^g | \mathbf{\Lambda}^{(g)} | \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g \rangle &= \langle \mathcal{Y}_{\ell, m}^g | \left\{ \mathbf{L}^{(g)} + g \frac{1}{r} \mathbf{x} \right\} | \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g \rangle \\ &= \left[1 - \left(\frac{\mathcal{R}_n^{(g)}}{r} \right)^2 \right] \langle \mathcal{Y}_{\ell, m}^g | \mathbf{L}^{(g)} | \mathcal{Y}_{\ell, m'}^g \rangle \end{aligned} \quad (3.64)$$

⁶Como um exemplo ilustrativo se $s = 1/2$ então $\mathbf{S}_{s=1/2} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$ é o operador de spin para partículas de spin $1/2$ (elétron, próton, neutron, etc). Aqui $\boldsymbol{\sigma}$ são as matrizes de Pauli.

No limite $g \gg n$ obtemos,

$$\frac{g}{n} \rightarrow \infty \implies \frac{\mathcal{R}_n^{(g)}}{r} = \frac{g}{\sqrt{g^2 \left(1 + \frac{n}{g}\right) \left(1 + \frac{n+1}{g}\right)}} \rightarrow 1 \quad (3.65)$$

então (3.65) nos diz que com o aumento de g o fator $1 - \left(\frac{\mathcal{R}_n^{(g)}}{r}\right)^2 \rightarrow 0$. Isto implica que no limite não-comutativo, os elementos de matriz do momento angular covariante (3.64) são desprezíveis comparados aqueles de $\mathbf{L}^{(g)}$. Sendo assim, devemos ter que,

$$\langle \mathcal{Y}_{\ell,m}^g | \mathbf{L}^{(g)} | \mathcal{Y}_{\ell,m'}^g \rangle = -g \langle \mathcal{Y}_{\ell,m}^g | \frac{1}{r} \mathbf{x} | \mathcal{Y}_{\ell,m'}^g \rangle \implies \mathbf{x} = -\frac{r}{g} \mathbf{L}^{(g)} \quad (3.66)$$

como esperado.

3.2.3 Projção para Níveis de Landau Relativísticos

Usando o fato que os autoestados do operador Dirac-Landau são dados por,

$$n = 0 : \Psi_{\kappa_0,m}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{g-\frac{1}{2},m}^{g-\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad n = 1, 2, \dots : \Psi_{\pm\kappa_n,m}^g = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ \mp i \mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

com $j = g + n - \frac{1}{2}$. Podemos calcular os elementos de matriz do operador \mathbf{x} , nos níveis de Landau relativísticos, a partir da definição,

$$\mathbf{X}_{m,m'} \equiv \langle \Psi_{\pm\kappa_n,m}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\kappa_n,m'}^g \rangle \quad (3.68)$$

Para $n \neq 0$ devemos ter que,

$$\mathbf{X}_{m,m'} = -\tau_n'^{(g)} \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}}, \quad \text{onde} \quad \tau_n'^{(g)} = r \frac{g}{\left(g+n-\frac{1}{2}\right)\left(g+n+\frac{1}{2}\right)} \quad (3.69)$$

Se $n = 0 \implies j = g - \frac{1}{2}$, e temos,

$$\mathbf{X}_{m,m'} = -\tau_0'^{(g)} \mathbf{S}_{s=g-\frac{1}{2}} \quad \text{onde} \quad \tau_0'^{(g)} = \frac{r}{g+\frac{1}{2}} \quad (3.70)$$

Na derivação de (3.69) e (3.70) usamos (3.61).

As componentes X_j dos elementos de matriz (3.68) satisfazem a álgebra da esfera fuzzy (3.57), cujo raio é obtido de modo análogo ao procedimento feito na subseção anterior. Da eq. (3.69) temos,

$$\begin{aligned} \mathbf{X} \cdot \mathbf{X} &= \tau_n'^{(g)2} j(j+1) \\ &= \tau_n'^{(g)2} \left(g+n-\frac{1}{2}\right) \left(g+n+\frac{1}{2}\right) \equiv \mathcal{R}_n'^{(g)2} \end{aligned} \quad (3.71)$$

e para $n = 0$ segue que,

$$\mathcal{R}'_0^{(g)} = r \sqrt{\frac{g - \frac{1}{2}}{g + \frac{1}{2}}} \quad (3.72)$$

por outro lado se $n \neq 0$, ainda de (3.69) obtemos,

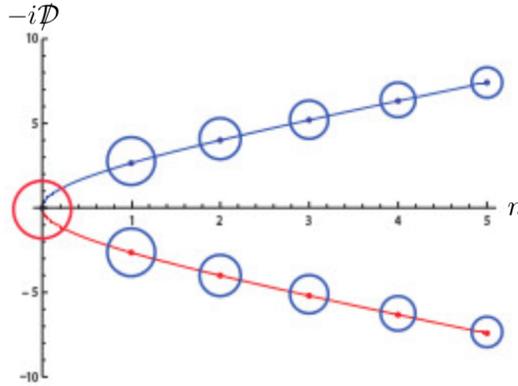
$$\mathcal{R}'_n^{(g)} = r \frac{g}{\sqrt{(g + n - \frac{1}{2})(g + n + \frac{1}{2})}} \quad (3.73)$$

Uma importante observação a se fazer é que os raios das esferas fuzzy são ordenados como [7],

$$\mathcal{R}'_0^{(g)} > \mathcal{R}'_1^{(g)} > \mathcal{R}'_2^{(g)} > \dots \quad (3.74)$$

ou seja, quanto maior for o índice do nível de Landau n , menor será a esfera. Deve-se ressaltar também que para autovalores simétricos do operador Dirac-Landau, ou seja, $\pm\kappa_n$ as esferas possuem tamanhos idênticos. A figura 3.2 ilustra estas propriedades da esfera fuzzy.

Figura 3.2: Os círculos ilustram as esferas fuzzy sobre os níveis de Landau relativísticos. Os tamanhos das esferas são idênticos para $\pm\kappa_n$ e decrescem monotonicamente com n . ($g = 3$ foi adotado na figura.)



Fonte: Referência [7]

É interessante compararmos os tamanhos das esferas fuzzy para os casos relativístico [(3.72), (3.73)] e não-relativístico (3.63). Vejamos,

$$n = 0 : \frac{\mathcal{R}'_0^{(g)}}{\mathcal{R}_0^{(g)}} = \sqrt{\frac{(g - \frac{1}{2})(g + 1)}{g(g + \frac{1}{2})}} < 1 \quad (3.75)$$

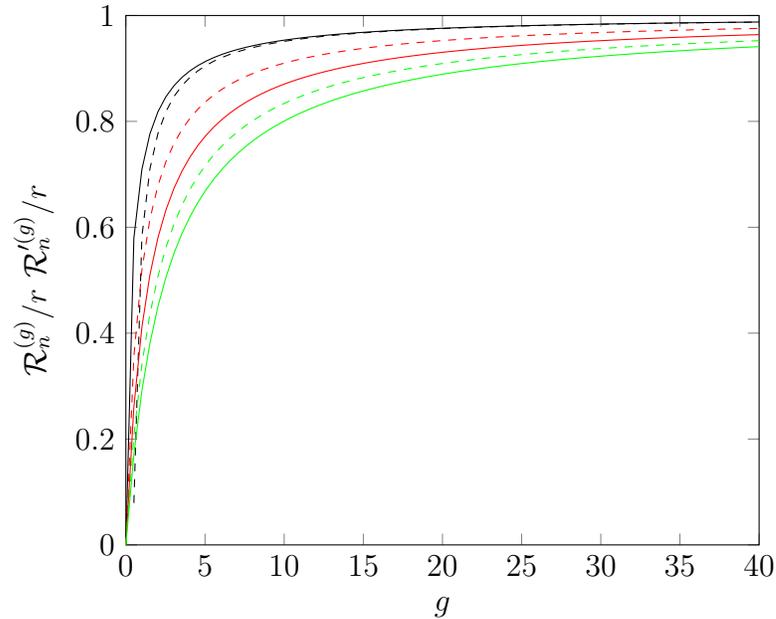
$$n \neq 0 : \frac{\mathcal{R}'_n^{(g)}}{\mathcal{R}_n^{(g)}} = \sqrt{\frac{(g + n)(g + n + 1)}{(g + n - \frac{1}{2})(g + n + \frac{1}{2})}} > 1 \quad (3.76)$$

As eqs. (3.75) e (3.76) nos dizem que do regime não-relativístico para o relativístico:

- ↪ Se $n = 0$ os raios das esferas fuzzy diminuem;
- ↪ Se $n \neq 0$ os raios das esferas fuzzy aumentam.

A figura 3.3 mostra o comportamento dos raios com respeito a carga do monopolo g para cada um dos casos: relativístico e não-relativístico.

Figura 3.3: Gráficos dos raios das esferas fuzzy com respeito a g . As curvas sólidas e tracejadas correspondem aos casos não-relativístico ($\mathcal{R}_n^{(g)}/r$) e relativístico ($\mathcal{R}'_n^{(g)}/r$), respectivamente. As cores preto, vermelho e verde são respectivamente para $n = 0, 1, 2$.



3.3 Deformação da Massa no Modelo de Landau Relativístico

Vamos analisar nesta seção a influência da deformação da massa no modelo de Landau relativístico e na esfera fuzzy. Este estudo é importante para a análise de materiais de Dirac tais como isolantes topológicos e grafeno [66, 67].

3.3.1 Deformação da Massa

No modelo de Landau relativístico, o termo de massa é incluído no operador Dirac-Landau como,

$$-i\mathcal{D} + \sigma_z M = \begin{pmatrix} M & -i\mathcal{D}_-^{(g+\frac{1}{2})} \\ -i\mathcal{D}_+^{(g-\frac{1}{2})} & -M \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

A simetria rotacional é mantida mesmo sob deformação da massa, pois,

$$[\sigma_z M, J_i] = 0 \quad (3.78)$$

Por outro lado, o termo de massa quebra a simetria quiral. Vejamos,

$$\{-i\mathcal{D} + \sigma_z M, \sigma_z\} = \begin{pmatrix} 2M & 0 \\ 0 & 2M \end{pmatrix} = 2M \neq 0 \quad (3.79)$$

Pode-se mostrar sem dificuldade que o operador $-i\mathcal{D}$ e o termo de massa $\sigma_z M$ não comutam,

$$[-i\mathcal{D}, \sigma_z M] \neq 0 \quad (3.80)$$

este resultado implica que não existem, em geral, autoestados simultâneos entre tais operadores, exceto para os modos-zero.

Veremos agora os autovalores e autoestados do operador Dirac-Landau massivo, seguiremos um procedimento análogo àquele feito na seção 3.1 para o problema de autovalores de $-i\mathcal{D}$. Calcularemos então o quadrado do operador Dirac-Landau massivo e a partir deste obteremos seus autovalores, temos,

$$\begin{aligned} (-i\mathcal{D} + \sigma_z M)^2 &= M^2 + (-i\mathcal{D})^2 + M\{-i\mathcal{D}, \sigma_z\} \\ &= M^2 + (-i\mathcal{D})^2 \end{aligned} \quad (3.81)$$

onde usamos a eq. (3.39). Uma vez que os autovalores de $-i\mathcal{D}$ são dados por $\pm\kappa_n = \pm\sqrt{n(2g+n)}$ segue de (3.81),

$$(-i\mathcal{D} + \sigma_z M)^2 = \xi_n^2$$

onde,

$$\xi_n^2 \equiv \kappa_n^2 + M^2 = n(2g+n) + M^2 \quad (3.82)$$

são os autovalores do quadrado do operador Dirac-Landau massivo. Então os autovalores do operador Dirac-Landau com deformação da massa são obtidos como⁷:

$$n = 0 : \quad \xi_{n=0} = +\sqrt{M^2} = M \quad (3.83)$$

$$n = 1, 2, \dots : \quad \pm\xi_n = \pm\sqrt{n(2g+n) + M^2} \quad (3.84)$$

⁷Para $n = 0$ se $g < 0$ devemos ter $\xi_{n=0} = -M$ ao invés de (3.83).

Pode-se verificar que os autoestados correspondentes são dados por,

$$n = 0 : \quad \Psi_{\xi_n=0=M,m}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad j = g - \frac{1}{2} \quad (3.85)$$

$$n = 1, 2, \dots : \quad \Psi_{\pm\xi_n,m}^g = \sqrt{\frac{\xi_n + \kappa_n}{2\xi_n}} \left(\Psi_{\pm\kappa_n,m}^g \pm \frac{M}{\xi_n + \kappa_n} \Psi_{\mp\kappa_n,m}^g \right) \quad (3.86)$$

mas usando a eq. (3.46) reescrevemos $\Psi_{\pm\xi_n,m}^g$ na forma matricial, temos,

$$\Psi_{\pm\xi_n,m}^g = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi_n + \kappa_n}{\xi_n}} \begin{pmatrix} \left(1 \pm \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ \mp i \left(1 \mp \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

onde $j = g + n - \frac{1}{2}$. A degenerescência dos autovalores (3.84) é a mesma do caso sem massa, isto é,

$$2j + 1 = 2(g + n) \quad (3.88)$$

É natural esperarmos que no limite de $M \rightarrow 0$ o resultado (3.87) se reduza aos autoestados sem deformação da massa (3.46), ou seja,

$$\Psi_{\pm\xi_n,m}^g \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ \mp i \mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \Psi_{\pm\kappa_n,m}^g; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.89)$$

Por outro lado, no limite de $M \rightarrow \infty$, temos da eq. (3.82),

$$\frac{\xi_n^2 - M^2}{2M} = \frac{\kappa_n^2}{2M} \implies \xi_n - M \simeq \frac{\kappa_n^2}{2M} \quad (3.90)$$

onde usamos o fato que neste limite $\frac{\kappa_n^2}{M^2} \ll 1$.

Por outro lado para os autoestados,

$$\Psi_{+\xi_n,m}^g \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\kappa_n,m}^g + \Psi_{-\kappa_n,m}^g) \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad \Psi_{-\xi_n,m}^g \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ i \mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.91)$$

Apesar do operador Dirac-Landau com deformação da massa não obedecer a simetria quiral (3.79), podemos pensar na existência de algum operador quiral geral tal que o operador Dirac-Landau massivo agora possa anticomutar e em consequência obedecer uma nova simetria quiral, sendo esta última mais geral. Tal operador quiral generalizado é dado por [7],

$$\mathcal{Q} = -i\sigma_z \mathcal{D} = -\frac{1}{2}i\sigma_z \mathcal{D} - \frac{1}{2}i\sigma_z \mathcal{D} = \frac{1}{2}[\sigma_z, -i\mathcal{D}] \quad (3.92)$$

onde usamos o fato que $[\sigma_z, -i\mathcal{D}] \neq 0$. No entanto, podemos expressar \mathcal{Q} em coordenadas esféricas e para tanto vamos usar o fato que,

$$-i\mathcal{D} = -i\sigma_x \left(\partial_\theta + \frac{1}{2} \cot \theta \right) - i\sigma_y \frac{1}{\sin \theta} (\partial_\phi + ig \cos \theta) \quad (\text{seção 3.1})$$

e a propriedade $\sigma_l \sigma_m = \delta_{lm} + i\varepsilon_{lmk} \sigma_k$, temos,

$$\mathcal{Q} = \left(\partial_\theta + \frac{1}{2} \cot \theta \right) \sigma_y - \frac{1}{\sin \theta} (\partial_\phi + ig \cos \theta) \sigma_x \quad (3.93)$$

Uma vez que conhecemos a forma de \mathcal{Q} (3.92), usando (3.39) pode-se mostrar que de fato o operador Dirac-Landau massivo $-i\mathcal{D} + M\sigma_z$ satisfaz a simetria quiral generalizada,

$$\{\mathcal{Q}, -i\mathcal{D} + \sigma_z M\} = 0 \quad (3.94)$$

A eq. (3.94) tem como consequência que os autoestados de $-i\mathcal{D} + \sigma_z M$ dados por (3.85) e (3.86) estão relacionados pela transformação quiral \mathcal{Q} . Com um pouco de álgebra mostra-se que,

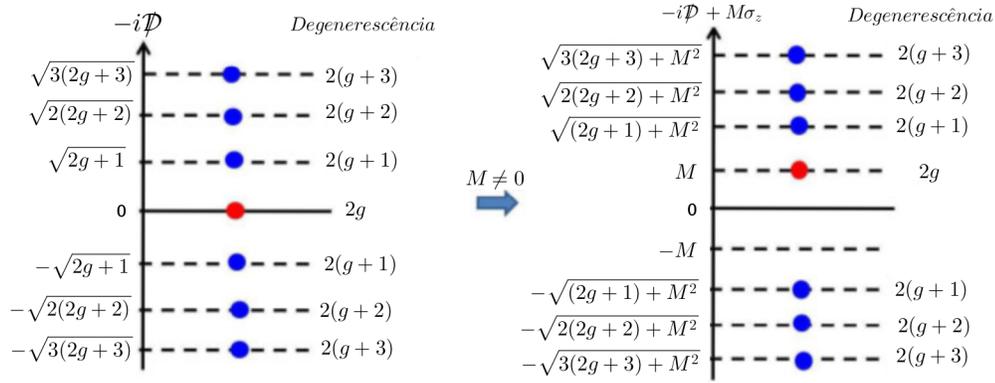
$$\mathcal{Q}\Psi_{\pm\xi_n, m}^g = \pm\kappa_n \Psi_{\mp\xi_n, m}^g \quad (3.95)$$

No limite sem massa, $-i\mathcal{D} + \sigma_z M \rightarrow -i\mathcal{D} = \pm\kappa_n \xrightarrow{\text{Da eq. (3.92)}} \mathcal{Q} \rightarrow \pm\kappa_n \sigma_z$.

Faremos agora alguns comentários acerca dos principais “pontos” discutidos:

- ↪ Primeiro: os modos-zero para o operador Dirac-Landau sem massa (3.42) são os mesmos daqueles para o caso massivo (3.85) porém estes últimos com autovalor não nulo e igual a M ;
- ↪ Segundo: uma vez que a simetria rotacional $SU(2)$ é mantida mesmo sob deformação da massa (3.78), os autoestados do operador Dirac-Landau massivo são também autoestados do Casimir \mathbf{J}^2 ;
- ↪ Terceiro: a influência da deformação da massa, representada pelo termo de massa ($M > 0$) nos autoestados (3.87), é que ele aumenta/diminui a contribuição da componente superior/inferior para $\Psi_{+\xi_n, m}^g$ (o oposto ocorre para $\Psi_{-\xi_n, m}^g$);
- ↪ Por último: assim como no caso sem massa, a transformação quiral generalizada \mathcal{Q} relaciona autoestados com autovalores de sinais opostos como pode ser visto em (3.95).

A figura 3.4 mostra o espectro do operador Dirac-Landau *com* e *sem* o termo de massa, perceba que no caso com massa não há simétrico para $+M$, este fato é conhecido como “anomalia de paridade” [7].

Figura 3.4: Espectro do operador Dirac-Landau *com e sem* o termo de massa.

Fonte: Referência [7]

3.3.2 Introdução de Esferas Fuzzy via Deformação da Massa

A introdução de esferas fuzzy via modelo de Dirac-Landau com deformação da massa é feita como,

$$n = 0 : \quad \mathbf{X}_{\xi_0=+M} = \langle \Psi_{\xi_0=M}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\xi_0=M}^g \rangle \quad (3.96)$$

$$n = 1, 2, \dots : \quad \mathbf{X}_{\pm\xi_n} = \langle \Psi_{\pm\xi_n}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\xi_n}^g \rangle \quad (3.97)$$

De (3.96) obtemos,

$$\mathbf{X}_{\xi_0=+M} = \left\langle \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \left| \mathbf{x} \right| \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \right\rangle = -\tau_0'^{(g)} \cdot \mathbf{S}_{s=g-\frac{1}{2}}, \quad j = g - \frac{1}{2} \quad (3.98)$$

onde,

$$\tau_0'^{(g)} = r \frac{1}{g + \frac{1}{2}} \quad (3.99)$$

Por outro lado (3.97) nos fornece,

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\pm\xi_n} &= - \left(1 \mp \frac{1}{2g} \frac{M}{\xi_n} \right) \tau_n'^{(g)} \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \\ &= -\tau_{\pm\xi_n}'^{(g)}(M) \cdot \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.100)$$

onde definimos,

$$\tau_{\pm\xi_n}'^{(g)}(M) = \left(1 \mp \frac{1}{2g} \frac{M}{\xi_n} \right) \tau_n'^{(g)}, \quad \text{com } n = 1, 2, \dots \quad (3.101)$$

E usamos o fato que,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\pm\kappa_n}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\kappa_n}^g \rangle &= \langle \Psi_{\mp\kappa_n}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\mp\kappa_n}^g \rangle = -\tau_n'^{(g)} \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \\ \langle \Psi_{\pm\kappa_n}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\mp\kappa_n}^g \rangle &= \langle \Psi_{\mp\kappa_n}^g | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\kappa_n}^g \rangle = \frac{1}{2g} \tau_n'^{(g)} \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

com $\tau_n^{(g)}$ dado por (3.69).

Pode-se demonstrar facilmente que o fator $\tau_{\pm\xi_n}^{(g)}(M)$ tem as propriedades,

$$\tau_{\pm\xi_n}^{(g)}(-M) = \tau_{\mp\xi_n}^{(g)}(M) \quad (3.102)$$

$$\tau_{+\xi_n}^{(g)}(M) + \tau_{-\xi_n}^{(g)}(M) = 2\tau_n^{(g)} \quad (3.103)$$

De modo análogo ao que foi feito na seção anterior, os raios das esferas fuzzy são obtidos por,

$$\mathbf{X}_{\pm\xi_n} \cdot \mathbf{X}_{\pm\xi_n} = \mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)2} \quad (3.104)$$

mas de (3.100), após um pouco de álgebra, obtemos de (3.104),

$$\mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)}(M) \equiv \tau_{\pm\xi_n}^{(g)}(M) \cdot \sqrt{\left(g + n - \frac{1}{2}\right)\left(g + n + \frac{1}{2}\right)} \quad (3.105)$$

A eq. (3.105) nos mostra que os raios das esferas fuzzy agora *dependem* do parâmetro de massa M , isso devido a presença do fator $\tau_{\pm\xi_n}^{(g)}$.

Uma propriedade interessante é que a soma dos raios para os autovalores $+\xi_n$ e $-\xi_n$ *não depende* da massa e inclusive resgata o mesmo resultado que o caso *sem* massa, ou seja,

$$\mathcal{R}_{+\xi_n}^{(g)}(M) + \mathcal{R}_{-\xi_n}^{(g)}(M) = 2\mathcal{R}_n^{(g)} \quad (3.106)$$

onde usamos a propriedade (3.103) e como sabemos $\mathcal{R}_n^{(g)}$ é dado por (3.73).

Uma vez que conhecemos a forma de $\mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)}$ podemos estudar seu comportamento com respeito ao caso sem massa $\mathcal{R}_n^{(g)}$. Então vamos definir,

$$r_{\pm,n} \equiv \frac{\mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)}(M)}{\mathcal{R}_n^{(g)}} = 1 \mp \frac{1}{2g} \frac{M}{\xi_n} \quad (3.107)$$

Na ausência de massa ($M = 0$) vemos que $r_{\pm,n} \rightarrow 1$, e isto faz sentido uma vez que neste caso $\mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)} \rightarrow \mathcal{R}_n^{(g)}$. Por outro lado, este resultado significa que existem duas esferas fuzzy idênticas para $+\kappa_n$ e $-\kappa_n$.

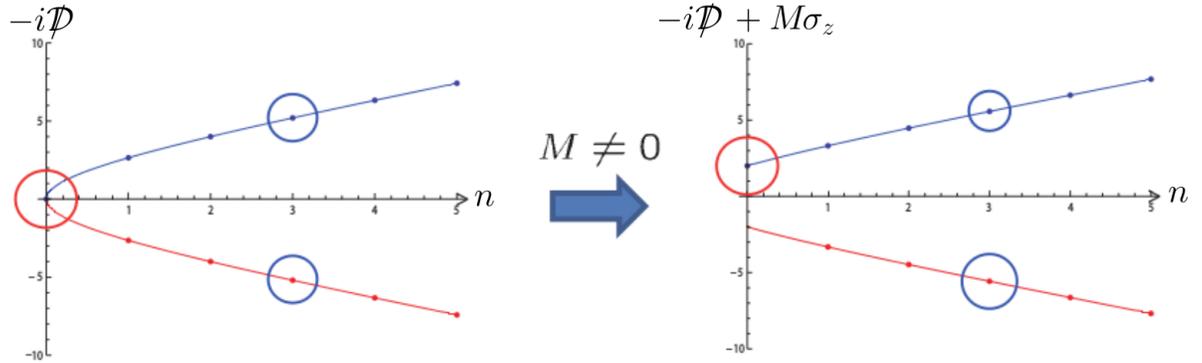
A eq. (3.107) nos diz que o efeito do parâmetro de massa M sobre os raios das esferas fuzzy é tal que, quando $M \rightarrow \infty$ os raios tendem a $1 \pm \frac{1}{2g}$ de seus tamanhos originais, sendo estes últimos os raios das esferas fuzzy no limite não-relativístico com $(n - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}, g \mp \frac{1}{2})$. Matematicamente,

$$\mathcal{R}_{+\xi_n}^{(g)}(M) \xrightarrow{M \rightarrow \infty} \mathcal{R}_n^{(g-\frac{1}{2})} \quad (3.108)$$

$$\mathcal{R}_{-\xi_n}^{(g)}(M) \xrightarrow{M \rightarrow \infty} \mathcal{R}_{n-1}^{(g+\frac{1}{2})} \quad (3.109)$$

A figura 3.5 mostra as esferas fuzzy para os casos *com* e *sem* o termo de massa M . Note como os tamanhos mudam sob deformação da massa.

Figura 3.5: Mudança do tamanho da esfera fuzzy sob deformação da massa. O círculo vermelho representa a esfera fuzzy para $n = 0$ enquanto que os círculos azuis indicam as esferas fuzzy para os autovalores $\pm\kappa_{n=3}$ ($g = 3$ e $M = 2$ foram adotados.)



Fonte: Referência [7]

3.4 Relações com o Sistema de Pauli-Schrödinger

Nesta seção, mostraremos que o modelo de Landau relativístico e o sistema não-relativístico de Pauli-Schrödinger estão relacionados por uma transformação de ‘gauge’ $SU(2)$. E para tanto, teremos como base teórica a generalização do trabalho de Abrikosov sobre o operador de Dirac livre [68, 69], feita por Kazuki Hasebe [7], em que é incluído o campo de gauge do monopolo.

3.4.1 Transformação de Gauge $SU(2)$ e a Álgebra do Grupo de Lorentz $SO(3, 1)$

Abrikosov mostrou em [68, 69] que os autoestados do operador Dirac livre (na ausência de campo magnético), estão relacionados com os harmônicos esféricos spinoriais pela transformação $SU(2)$:

$$V(\theta, \phi) \equiv e^{-\frac{i\phi}{2}\sigma_z} e^{-\frac{i\theta}{2}\sigma_y} \quad (3.110)$$

onde as exponenciais representam rotações e θ, ϕ são ângulos de Euler. Vamos expressar $V(\theta, \phi)$ na forma matricial e para tanto utilizaremos o teorema de Cayley-

Hamilton⁸. Então, seguindo o procedimento descrito em [70], obtemos,

$$e^{-\frac{i\phi}{2}\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad e \quad e^{-\frac{i\theta}{2}\sigma_y} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \\ \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.111)$$

e substituindo em (3.110), temos,

$$V(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} & -\operatorname{sen} \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (3.112)$$

Vejamos o que ocorre com as matrizes de Pauli sob a transformação $SU(2)$ gerada por $V(\theta, \phi)$:

$$V(\theta, \phi)^\dagger \sigma_x V(\theta, \phi) = \sum_k \sigma_k R_{kx} \quad (3.113)$$

$$V(\theta, \phi)^\dagger \sigma_y V(\theta, \phi) = \sum_k \sigma_k R_{ky} \quad (3.114)$$

$$V(\theta, \phi)^\dagger \sigma_z V(\theta, \phi) = \sum_k \sigma_k R_{kz} \quad (3.115)$$

ou mais compactamente,

$$V(\theta, \phi)^\dagger \sigma_j V(\theta, \phi) = \sigma_k R_{kj}(\theta, \phi) \quad (3.116)$$

onde usamos a convenção de Einstein da soma. Então pela eq. (3.116), inferimos que o efeito de $V(\theta, \phi)$ sobre as matrizes de Pauli é a indução de uma rotação espacial descrita pela matriz R_{kj} dada por,

$$R_{kj}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \operatorname{sen} \phi & -\operatorname{sen} \theta \\ -\operatorname{sen} \phi & \cos \phi & 0 \\ \operatorname{sen} \theta \cos \phi & \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.117)$$

Por outro lado, $V(\theta, \phi)$ também produz um campo de gauge puro $SU(2)$ dado por [7],

$$\mathcal{W} = -iV^\dagger dV \quad (3.118)$$

e usando a eq. (3.112) podemos expressá-lo na forma matricial, temos,

$$\begin{aligned} \mathcal{W} &= -i \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i (\cos^2 \frac{\theta}{2} - \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}) d\phi & -d\theta + 2i \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\phi \\ d\theta + 2i \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\phi & i (\cos^2 \frac{\theta}{2} - \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}) d\phi \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\cos \theta d\phi & i d\theta + \operatorname{sen} \theta d\phi \\ -i d\theta + \operatorname{sen} \theta d\phi & \cos \theta d\phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.119)$$

⁸O teorema de Cayley-Hamilton diz que toda matriz quadrada M é um zero do seu polinômio característico. Em outras palavras, se $p = p(\lambda)$ é o polinômio característico de M então $p(M) = 0$.

Uma propriedade interessante é que o campo de gauge do monopolo $U(1)$ (A.2) pode ser obtido a partir de (3.119) como,

$$A = -ig \operatorname{tr}(\sigma_z V^\dagger dV) \quad (3.120)$$

sendo a verificação trivial e portanto deixada a cargo do leitor.

Notemos que o momento angular total \mathbf{J} (3.16) e o operador Dirac-Landau (3.31), são escritos em termos de um acoplamento entre operadores diferenciais e matrizes de Pauli, porém submetidos a transformação $V(\theta, \phi)$, tal acoplamento é “quebrado,” e assim, estes operadores são escritos em termos de duas partes separadas, uma correspondendo somente a operador diferencial e a outra apenas de matriz de Pauli. Então, matematicamente,

$$V(\theta, \phi) \mathbf{J} V(\theta, \phi)^\dagger = \mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (3.121)$$

$$V(\theta, \phi) (-i\mathcal{D}) V(\theta, \phi)^\dagger = \mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.122)$$

onde como vimos no apêndice A, $\mathbf{L}^{(g)}$ é o operador momento angular não-relativístico (A.20), porém $\mathbf{K}^{(g)}$ é chamado operador ‘boost’. Usando as eqs. [(3.31),(A.50),(3.112)] verifica-se (3.122) e automaticamente obtém-se as componentes do operador boost, dadas por,

$$K_x^{(g)} \equiv -i \cos \theta \cos \phi \partial_\theta + i \frac{1}{\sin \theta} \sin \phi \partial_\phi - g \cot \theta \sin \phi + i \sin \theta \cos \phi \quad (3.123)$$

$$K_y^{(g)} \equiv -i \cos \theta \sin \phi \partial_\theta - i \frac{1}{\sin \theta} \cos \phi \partial_\phi + g \cot \theta \cos \phi + i \sin \theta \sin \phi \quad (3.124)$$

$$K_z^{(g)} \equiv i \sin \theta \partial_\theta + i \cos \theta \quad (3.125)$$

A eq. (3.122) representa a transformação do operador Dirac-Landau no ‘operador helicidade’, $\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Note que $K_j^{(g)}$ são operadores diferenciais apenas. Por outro lado, a transformação inversa de [(3.121),(3.122)] é tal que,

$$V^\dagger V \mathbf{J} V^\dagger V = V^\dagger \mathbf{L}^{(g)} V + V^\dagger \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} V \implies \mathbf{J} = V^\dagger \mathbf{L}^{(g)} V + V^\dagger \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} V \quad (3.126)$$

$$V^\dagger V (-i\mathcal{D}) V^\dagger V = V^\dagger \mathbf{K}^{(g)} V V^\dagger \boldsymbol{\sigma} V \implies -i\mathcal{D} = V^\dagger \mathbf{K}^{(g)} V \cdot V^\dagger \boldsymbol{\sigma} V \quad (3.127)$$

Podemos expressar o operador boost em termos das derivadas covariantes Cartesianas no espaço 3D, $D_j = \partial_j - iA_j$ ($j = x, y, z$), onde A_j é o campo de gauge (A.2). Das eqs. [(3.123)-(3.125)], obtemos,

$$K_x^{(g)} = -iD_x|_{r=1} + i\frac{x}{r}; \quad K_y^{(g)} = -iD_y|_{r=1} + i\frac{y}{r}; \quad K_z^{(g)} = -iD_z + i\frac{z}{r} \quad (3.128)$$

onde usamos as expressões para ∂_x, ∂_y e ∂_z em coordenadas esféricas (veja nota de rodapé 3). As equações acima, todavia, podem ser postas numa forma compacta,

$$\mathbf{K}^{(g)} = -i\mathbf{D}|_{r=1} + i\frac{\mathbf{x}}{r} \quad (3.129)$$

onde o termo $i\frac{\boldsymbol{x}}{r}$ (não-hermitiano) vem da conexão de spin presente no operador Dirac-Landau. Uma vez que sabemos a forma de $K_j^{(g)}$ [(3.123)-(3.125)], com um pouco de álgebra, pode-se mostrar que eles satisfazem as relações de comutação do grupo de Lorentz $SO(3,1)$ ⁹:

$$[K_j^{(g)}, K_l^{(g)}] = -i\varepsilon_{jlk}L_k^{(g)}; \quad [L_j^{(g)}, K_l^{(g)}] = i\varepsilon_{jlk}K_k^{(g)}; \quad [L_j^{(g)}, L_l^{(g)}] = i\varepsilon_{jlk}L_k^{(g)} \quad (3.130)$$

É interessante calcularmos o quadrado do operador boost $\mathbf{K}^{(g)}$, os motivos para isso ficarão óbvios dentro de instantes, temos explicitamente,

$$\mathbf{K}^{(g)2} = -\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) - \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 - 2ig\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\partial_\phi + g^2\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} + 1 \quad (3.131)$$

mas usando o fato que,

$$\mathbf{L}^{(g)2} = -\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) - \frac{1}{\sin^2\theta}(\partial_\phi + ig\cos\theta)^2 + g^2 \quad (\text{apêndice A})$$

obtemos, pela eq. (3.131),

$$\mathbf{K}^{(g)2} = \mathbf{L}^{(g)2} - g^2 + 1 = \mathbf{\Lambda}^{(g)2} + 1 \quad (3.132)$$

Comparando (3.132) com (A.43), vemos que o quadrado do operador boost está relacionado com o Hamiltoniano de Landau não-relativístico como,

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2M}(\mathbf{K}^{(g)2} - 1) \quad (3.133)$$

Vale a pena fazermos comentários sobre alguns resultados obtidos:

- ↪ Primeiro: Há duas interpretações para as matrizes de Pauli da transformação $V(\theta, \phi)$: 1^a são os geradores da rotação espacial em (3.116) e 2^a são os geradores do grupo de gauge (3.119);
- ↪ Segundo: $V(\theta, \phi)$ atua como uma transformação de gauge sobre $\mathbf{K}^{(g)}$ e $\mathbf{L}^{(g)}$ [(3.126), (3.127)];
- ↪ Terceiro: O grupo $SO(3,1)$ descreve as transformações físicas contínuas de boosts ($\mathbf{K}^{(g)}$) e rotações ($\mathbf{L}^{(g)}$) sendo classificado como um grupo de Lie, porém, é ainda um subgrupo de um grupo maior denominado grupo de Poincaré (veja [71]);
- ↪ Por último: Note que a comutação de dois boosts (3.130) resulta em uma rotação. Isto não é nada óbvio à primeira vista.

⁹Pode-se pensar no grupo $SO(3,1)$ como uma extensão de $SO(3)$ (3D), porém, inclui um grupo de transformações envolvendo o tempo [71].

3.4.2 O Problema de Autovalores para $\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$

A partir da relação¹⁰ $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$, notamos que o quadrado do operador helicidade produz um hamiltoniano de Landau não-relativístico,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} [(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 - 1] = \frac{1}{2M} (\mathbf{K}^{(g)2} + \mathbf{L}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - 1) \quad (3.134)$$

onde usamos as relações de comutação das matrizes de Pauli (veja a seção 3.1) e o fato que,

$$(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{K}^{(g)2} + \mathbf{L}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.135)$$

obtida a partir de (3.130). Por outro lado, de (A.20), obtemos,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} (\boldsymbol{\Lambda}^{(g)2} + \boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.136)$$

onde estamos considerando $r = 1$. Em (3.136) os termos $\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ (conhecido como operador Paridade) e $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ representam os acoplamentos de spin-órbita e Zeeman, respectivamente.

Podemos reescrever $(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2$ mais convenientemente, de modo que nos leve aos autovalores do operador helicidade. De (3.130) e (3.132), temos,

$$(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \left(\mathbf{L}^{(g)} + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \right)^2 - g^2 + \frac{1}{4} \quad (3.137)$$

$$[\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}] = i(\mathbf{K}^{(g)} \times \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{K}^{(g)} \times \boldsymbol{\sigma}) = 0 \quad (3.138)$$

Note que se fizermos $(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \rightarrow -i\mathcal{D}$ e $\mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \rightarrow \mathbf{J}$ nas equações acima, recuperamos os resultados conhecidos,

$$(-i\mathcal{D})^2 = \mathbf{J}^2 - g^2 + \frac{1}{2}; \quad [-i\mathcal{D}, \mathbf{J}] = 0$$

logo, inferimos que os autovalores de $(\mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma})^2$ são dados por,

$$\left(\mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \right)^2 = j(j+1), \quad j = g + n - \frac{1}{2} \text{ com } n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.139)$$

e então substituindo este último resultado em (3.137),

$$(\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = n(n+2g) \implies \mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \pm \sqrt{n(n+2g)} \quad (3.140)$$

¹⁰Veja exercício 13.2 de [55].

Vemos que os autovalores do operador helicidade são idênticos aos níveis de Landau relativísticos (3.37). Analogamente a \mathbf{J}^2 e J_z , os operadores $(\mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma})^2$ e $L_z^{(g)} + \frac{1}{2}\sigma_z$ possuem autoestados simultâneos, tal que,

$$\left(\mathbf{L}^{(g)} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)^2 \Omega_{j,m}^g = j(j+1)\Omega_{j,m}^g; \quad \left(L_z^{(g)} + \frac{1}{2}\sigma_z\right) \Omega_{j,m}^g = m\Omega_{j,m}^g \quad (3.141)$$

onde $m = -j, \dots, j$ e $\Omega_{j,m}^g$ são dados pelos espinores de harmônicos monopulares,

$$\Omega_{j,m}^g = \frac{1}{\sqrt{2j}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+m} \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}}^g \\ \sqrt{j-m} \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}}^g \end{pmatrix}; \quad \Omega_{j,m}^g = \frac{1}{\sqrt{2j+2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{j-m+1} \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}}^g \\ \sqrt{j+m+1} \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}}^g \end{pmatrix} \quad (3.142)$$

Fazendo uma combinação linear das funções (3.142), construímos os autoestados de $\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, ou seja,

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm\kappa_n, m}^g &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\Omega_{j,m}^g(\theta, \phi) \pm i\Omega_{j,m}^g(\theta, \phi)) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{j+1}} \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}}^g \pm i\sqrt{\frac{j+m}{j}} \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}}^g \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{j+1}} \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}}^g \pm i\sqrt{\frac{j-m}{j}} \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}}^g \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.143)$$

onde $\pm\kappa_n$ são os autovalores do operador helicidade e j é dado por (3.139). Por outro lado, os modos-zero $\kappa_{n=0, m} = 0$ são dados por,

$$\Phi_{\kappa_0, m}^g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{g-m+\frac{1}{2}}{g+\frac{1}{2}}} \mathcal{Y}_{g, m-\frac{1}{2}}^g \pm i\sqrt{\frac{g-\frac{1}{2}+m}{g-\frac{1}{2}}} \mathcal{Y}_{g-1, m-\frac{1}{2}}^g \\ \sqrt{\frac{g+m+\frac{1}{2}}{g+\frac{1}{2}}} \mathcal{Y}_{g, m+\frac{1}{2}}^g \pm i\sqrt{\frac{g-m-\frac{1}{2}}{g-\frac{1}{2}}} \mathcal{Y}_{g-1, m+\frac{1}{2}}^g \end{pmatrix} \quad (3.144)$$

onde usamos o fato que $n = 0 \Rightarrow j = g - \frac{1}{2}$. Porém, notando que $\mathcal{Y}_{g-1, m \pm \frac{1}{2}}^g \rightarrow 0$, reescrevemos (3.144). Usando (A.36) e fazendo $\ell \rightarrow g - 1$ e $m \rightarrow m \pm \frac{1}{2}$, temos,

$$\Phi_{\kappa_0, m}^g = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2g+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{g-m+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}_{g, m-\frac{1}{2}}^g \\ \sqrt{g+m+\frac{1}{2}} \mathcal{Y}_{g, m+\frac{1}{2}}^g \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Omega_{g-\frac{1}{2}, m}^g \quad (3.145)$$

com $m = -g + \frac{1}{2}, \dots, g - \frac{1}{2}$. Os espinores (3.142) estão relacionados aos autoestados do Casimir \mathbf{J}^2 , $\Upsilon_{j,m}^g$ e $\Upsilon'_{j,m}^g$ (3.28), pela transformação $SU(2)$ (3.12):

$$\Upsilon_{j,m}^g = V(\theta, \phi)^\dagger (\text{sen } \beta \cdot \Omega_{j,m}^g + \text{cos } \beta \cdot \Omega_{j,m}^g) \quad (3.146)$$

$$\Upsilon'_{j,m}^g = V(\theta, \phi)^\dagger (-\text{cos } \beta \cdot \Omega_{j,m}^g + \text{sen } \beta \cdot \Omega_{j,m}^g) \quad (3.147)$$

onde,

$$\tan \beta = \sqrt{\frac{j-g+\frac{1}{2}}{j+g+\frac{1}{2}}} \quad (3.148)$$

O leitor pode verificar facilmente os resultados [(3.146),(3.147)], porém, é importante notar que essas equações têm como consequência:

$$\begin{aligned}\Psi_{\pm\kappa_n,m}^g &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Upsilon_{j,m}'^g \mp i\Upsilon_{j,m}^g) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[-V(\theta, \phi)^\dagger e^{\pm i\beta} \Omega_{j,m}'^g \mp iV(\theta, \phi)^\dagger e^{\pm i\beta} \Omega_{j,m}^g] \\ &= -e^{\pm i\beta} V(\theta, \phi)^\dagger \Phi_{\pm\kappa_n,m}^g\end{aligned}\quad (3.149)$$

Então, a menos do fator de fase (que não interfere na física do sistema), V age sobre $\Phi_{\pm\kappa_n,m}^g$ de modo a transformá-lo em $\Psi_{\pm\kappa_n,m}^g$. Para os modos-zero é fácil ver que,

$$\Psi_{\kappa_0=0,m}^g = -V(\theta, \phi)^\dagger \Phi_{\kappa_0=0,m}^g \quad (3.150)$$

3.4.3 Relações entre os Autoestados de $-i\mathcal{D}$ e \mathcal{H}_{P-S}

Começaremos com o Hamiltoniano de Pauli-Schrödinger dado por,

$$\mathcal{H}_{P-S} = -\frac{1}{2M}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D})^2 = -\frac{1}{2M}(\mathbf{D}^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}) \quad (3.151)$$

onde \mathbf{D} é a derivada covariante no espaço curvo 3D, cujas componentes são dadas por (A.9) e \mathbf{F} é o campo de força (magnético) devido o monopolo. Na derivação de (3.151) usamos a propriedade $\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot (\mathbf{w} \times \mathbf{u})$ e a eq. (A.5) para obter,

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D})^2 = \mathbf{D}^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F} \quad (3.152)$$

É conveniente expressarmos o hamiltoniano de Pauli-Schrödinger em coordenadas esféricas. Assim, usando as relações¹¹

$$(\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1)^2 = \boldsymbol{\Lambda}^{(g)2} + \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1 = (\mathbf{K}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 \quad (3.153)$$

$$-\frac{1}{2M}\mathbf{D}^2 = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{Mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2Mr^2}\boldsymbol{\Lambda}^{(g)2} \quad (3.154)$$

Devemos ter que,

$$\mathcal{H}_{P-S} = -\frac{1}{2Mr^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2Mr^2}(\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1) \quad (3.155)$$

Sobre uma esfera unitária ($r = 1$), reduz-se para,

$$\mathcal{H}_{P-S}|_{r=1} = \frac{1}{2M}(\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1) \quad (3.156)$$

¹¹A 1ª iguadade de (3.153) será demonstrada mais adiante, enquanto que (3.154) foi obtido da expressão do hamiltoniano de Landau não-relativístico (A.43).

Da eq. (3.156) inferimos que os autoestados do hamiltoniano de Pauli-Schrödinger são os mesmos do operador paridade $\mathbf{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, dados por,

$$\Xi_{\pm\kappa_n, m}^g = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} \pm \sqrt{1 - \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} \right) \Omega_{j, m}^g + \frac{1}{2} \left(\mp \sqrt{1 + \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} + \sqrt{1 - \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} \right) \Omega_{j, m}'^g \quad (3.157)$$

onde $\Omega_{j, m}^g$ e $\Omega_{j, m}'^g$ são calculados a partir de (3.142). Note que $\pm\kappa_n$ são também autovalores de $(\mathbf{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1)$ devido (3.153). Como prometido, vamos verificar a 1ª igualdade de (3.153) donde utilizaremos as relações de comutação¹² para $\Lambda_j^{(g)}$ (A.12):

$$[\Lambda_j^{(g)}, \Lambda_l^{(g)}] = -i\varepsilon_{jlk}(L_k^{(g)} - 2\Lambda_k^{(g)}) \quad (3.158)$$

Devemos ter que,

$$\begin{aligned} (\mathbf{\Lambda}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1)^2 &= [\Lambda_x^{(g)}\sigma_x + \Lambda_y^{(g)}\sigma_y + \Lambda_z^{(g)}\sigma_z + 1][\Lambda_x^{(g)}\sigma_x + \Lambda_y^{(g)}\sigma_y + \Lambda_z^{(g)}\sigma_z + 1] \\ &= (\mathbf{\Lambda}^{(g)})^2 + [\Lambda_x^{(g)}, \Lambda_y^{(g)}]i\sigma_z - [\Lambda_x^{(g)}, \Lambda_z^{(g)}]i\sigma_y + [\Lambda_y^{(g)}, \Lambda_z^{(g)}]i\sigma_x + 2\Lambda_x^{(g)}\sigma_x + 2\Lambda_y^{(g)}\sigma_y + 2\Lambda_z^{(g)}\sigma_z + 1 \\ &= \mathbf{\Lambda}^{(g)2} + \mathbf{L}^{(g)} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1 \quad \text{C.Q.D} \end{aligned}$$

Os autoestados $\Xi_{\pm\kappa_n, m}^g$ e $\Phi_{\pm\kappa_n, m}$ estão relacionados como,

$$\Xi_{\kappa_n, m}^g = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\varphi} \cdot \Phi_{\kappa_n, m}^g + e^{i\varphi} \cdot \Phi_{-\kappa_n, m}^g) \quad (3.159)$$

$$\Xi_{-\kappa_n, m}^g = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\varphi} \cdot \Phi_{\kappa_n, m}^g - e^{i\varphi} \cdot \Phi_{-\kappa_n, m}^g) \quad (3.160)$$

cuja verificação pode ser feita usando [(3.143), (3.157)] e nos leva a,

$$\text{sen } \varphi = -\frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} + \sqrt{1 - \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} \right) \text{ e } \text{cos } \varphi = -\frac{1}{2} \left(-\sqrt{1 + \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} + \sqrt{1 - \frac{g}{j + \frac{1}{2}}} \right)$$

satisfazendo, portanto,

$$\tan \varphi = -\frac{j + \frac{1}{2}}{g} \left(1 + \sqrt{1 - \left(\frac{g}{j + \frac{1}{2}} \right)^2} \right) \quad (3.161)$$

Como consequência de [(3.159), (3.160)], os autoestados de $-i\mathcal{D}$ e \mathcal{H}_{P-S} estão relacionados por,

$$\Psi_{\pm\kappa_n, m}^g = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\pm i\omega} \cdot V(\theta, \phi)^\dagger (\Xi_{\kappa_n, m}^g \mp i\Xi_{-\kappa_n, m}^g), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.162)$$

¹²Não é complicado verificar (3.158), embora exija um pouco de álgebra, devido a isso pouparemo-nos desse trabalho.

onde $\omega = \beta + \varphi$ tal que,

$$\tan \omega = -\frac{j(j + \frac{1}{2})(\sqrt{j + g + \frac{1}{2}} + \sqrt{j - g + \frac{1}{2}})}{j(j + \frac{1}{2})\sqrt{j - g + \frac{1}{2}} - g(g - \frac{1}{2})\sqrt{j + g + \frac{1}{2}}} \quad (3.163)$$

Para modos-zero $\kappa_n = 0$ obtemos da eq. (3.157),

$$\Xi_{\kappa_0=0,m}^g = \frac{\sqrt{2}}{2}(\Omega_{j,m}^g - \Omega'_{j,m}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\Omega'_{g-\frac{1}{2},m} = -\Phi_{\kappa_0=0,m}^g \quad (3.164)$$

onde usamos (3.142). Substituindo a expressão acima em (3.162), vemos que,

$$\Psi_{\kappa_0=0,m}^g = V(\theta, \phi)^\dagger \Xi_{\kappa_0=0,m}^g \quad (3.165)$$

Capítulo 4

Aplicações de Esfera Fuzzy em Grafeno

Neste capítulo, nós aplicamos todo o arcabouço teórico visto até o momento sobre modelos de Landau relativístico e esfera fuzzy no grafeno. Seguiremos a abordagem feita por K. Hasebe [7].

4.1 Vales das Esferas Fuzzy do Grafeno

4.1.1 Espectro do Grafeno

Vimos na seção 2.4 que no limite de baixas energias, as excitações da rede de grafeno são descritas por dois espinores bidimensionais de Dirac cujas componentes indicam os graus de liberdade das sub-redes A e B. Adicionalmente aos graus de liberdade das sub-redes, o grafeno também acomoda os graus de liberdade do vale dos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , e agora o hamiltoniano do grafeno é representado pelo operador Dirac-Landau que inclui a contribuição desses dois pontos, definido como,

$$-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+\oplus\mathbf{K}_-} \equiv \begin{pmatrix} -i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

onde $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+}$ e $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-}$ são os operadores Dirac-Landau em cada vale definidos por,

$$-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} \equiv -i\sigma_x\mathcal{D}_\theta - i\frac{1}{\sin\theta}\sigma_y\mathcal{D}_\phi, \quad -i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-} \equiv -i\sigma_x\mathcal{D}_\theta + i\frac{1}{\sin\theta}\sigma_y\mathcal{D}_\phi \quad (4.2)$$

com os operadores \mathcal{D}_θ e \mathcal{D}_ϕ dados em (3.12). Por outro lado, $\mathbf{0}$ é a matriz nula 2×2 .

Usando as eqs. (4.2) e a álgebra $SU(2)$ das matrizes de Pauli, $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, pode-se mostrar que $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+}$ e $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-}$ estão relacionados por,

$$-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} = \sigma_x(-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-})\sigma_x \quad (4.3)$$

Definindo $\bar{g}_s \equiv g + \frac{1}{2}\sigma_z$ de modo que,

$$\mathbf{L}(\bar{g}_s) = \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(g+\frac{1}{2})} & 0 \\ 0 & \mathbf{L}^{(g-\frac{1}{2})} \end{pmatrix}$$

e usando (3.16), para o qual $g_s = g + \frac{1}{2}\sigma_z$, o operador momento angular total é construído como [7],

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(g_s)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}^{(\bar{g}_s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(g-\frac{1}{2})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{L}^{(g+\frac{1}{2})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{L}^{(g+\frac{1}{2})} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{L}^{(g-\frac{1}{2})} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

que satisfaz a álgebra $SU(2)$,

$$[J_j, J_l] = i\varepsilon_{jlk}J_k \quad (4.5)$$

Agora notando que a representação de $\mathbf{L}^{(g\pm\frac{1}{2})^2}$ na base dos harmônicos monopulares nos fornece $\mathbf{L}^{(g\pm\frac{1}{2})^2} = j(j+1)\mathbf{1}_{2j+1}$ e considerando os pontos de Fermi \mathbf{K}_+ , \mathbf{K}_- , reescrevemos (4.4) como,

$$\mathbf{J}^2 = \begin{pmatrix} j_{\mathbf{K}_+}(j_{\mathbf{K}_-} + 1)\mathbf{1}_{2j_{\mathbf{K}_+}+1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & j_{\mathbf{K}_-}(j_{\mathbf{K}_+} + 1)\mathbf{1}_{2j_{\mathbf{K}_-}+1} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

onde $\mathbf{1}_{2j+1}$ é a matriz identidade $(2j+1) \times (2j+1)$ e,

$$j_{\mathbf{K}_+} = g + n_{\mathbf{K}_+} - \frac{1}{2}, \quad j_{\mathbf{K}_-} = g + n_{\mathbf{K}_-} - \frac{1}{2} \quad \text{com} \quad n_{\mathbf{K}_+}, n_{\mathbf{K}_-} = 0, 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

Das eqs. (3.33) e (4.3), obtemos,

$$(-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_\pm})^2 = - \begin{pmatrix} \bar{\partial}_\mp^{(g\pm\frac{1}{2})} \bar{\partial}_\pm^{(g\mp\frac{1}{2})} & 0 \\ 0 & \bar{\partial}_\pm^{(g\mp\frac{1}{2})} \bar{\partial}_\mp^{(g\pm\frac{1}{2})} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

agora usando (A.51) e (A.52), o quadrado de $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+\oplus\mathbf{K}_-}$ fica,

$$(-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+\oplus\mathbf{K}_-})^2 = \mathbf{J}^2 - g^2 + \frac{1}{4} \quad (4.9)$$

O espectro do operador Dirac-Landau já foi calculado na seção 3.1, e para os pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- ele é o mesmo. Portanto, os autovalores de $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+\oplus\mathbf{K}_-}$ são dados por,

$$\pm\kappa_n = \pm\sqrt{n(2g+n)} \quad (4.10)$$

onde como sabemos $n = 0, 1, 2, \dots$. A degenerescência de cada nível de Landau relativístico deve ser,

$$2 \times (2j+1)|_{j=g+n-\frac{1}{2}} = 4(g+n) \quad (4.11)$$

como esperado. Note que $2 \times$ vem dos graus de liberdade correspondentes aos vales (\mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_-). Agora que conhecemos os autovalores do Hamiltoniano do grafeno, não é difícil mostrar que os autoestados são denotados por,

$$n = 0, j = g - \frac{1}{2} : \Psi_{\kappa_0=0,m;\mathbf{K}_+}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi_{\kappa_0=0,m;\mathbf{K}_-}^g = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots : \Psi_{\pm\kappa_n,m;\mathbf{K}_+}^g = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \\ \mp i\mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \Psi_{\pm\kappa_n,m;\mathbf{K}_-}^g = \begin{pmatrix} \mp i\mathcal{Y}_{j,m}^{g+\frac{1}{2}} \\ \mathcal{Y}_{j,m}^{g-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

A ação de σ_x sobre $\Psi_{\pm\kappa_n,m;\mathbf{K}_-}^g$ é tal que,

$$\Psi_{\pm\kappa_n,m;\mathbf{K}_+}^g = \sigma_x \Psi_{\pm\kappa_n,m;\mathbf{K}_-}^g \quad (4.14)$$

Então a matriz σ_x faz um ‘papel’ análogo aquele da matriz quirial σ_z (3.49), porém, aqui a relação é entre os autoestados correspondentes aos pontos de Fermi, com mesmo autovalor.

4.1.2 Deformação da Massa e Vales das Esferas Fuzzy \mathbf{K}_+ , \mathbf{K}_-

O hamiltoniano do grafeno com massa deformada, incluindo a contribuição dos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- é definido por,

$$(-i\mathcal{D} + M\sigma_z)_{\mathbf{K}_+\oplus\mathbf{K}_-} \equiv \begin{pmatrix} -i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} + M\sigma_z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-} + M\sigma_z \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Note que $-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} + M\sigma_z = -i\mathcal{D} + M\sigma_z$, cujos autoestados foram calculados na seção 3.3. Então, os autovalores do operador Dirac-Landau com massa deformada em \mathbf{K}_+ são dados por,

$$n = 0 : \xi_{n=0} = M \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \dots : \pm\xi_n = \pm\sqrt{n(n+2g) + M^2} \quad (4.16)$$

Por outro lado $(-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-} + M\sigma_z)^2 = (-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-})^2 + M^2$, donde tiramos que os autoestados do operador Dirac-Landau com massa deformada em \mathbf{K}_- são obtidos por,

$$n = 0 : -\xi_{n=0} = -M \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \dots : \pm\xi_n = \pm\sqrt{n(n+2g) + M^2} \quad (4.17)$$

Cada vale tem degenerescência $(2j+1)|_{j=g+n-\frac{1}{2}} = 2(g+n)$ com $n = 0, 1, 2, \dots$, e os autoestados correspondentes são,

$$\Psi_{\pm\xi_n, m; \mathbf{K}_+}^g(M) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi_n + \kappa_n}{\xi_n}} \begin{pmatrix} \left(1 \pm \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j, m}^{g-\frac{1}{2}} \\ \mp i \left(1 \mp \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j, m}^{g+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

$$\Psi_{\pm\xi_n, m; \mathbf{K}_-}^g(M) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\xi_n + \kappa_n}{\xi_n}} \begin{pmatrix} \mp i \left(1 \pm \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j, m}^{g+\frac{1}{2}} \\ \left(1 \mp \frac{M}{\xi_n + \kappa_n}\right) \mathcal{Y}_{j, m}^{g-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

onde, como já sabemos, $j = g + n - \frac{1}{2}$ e $n \in \mathbb{N}$. Usando as eqs. (4.16) e (4.17), obtemos o espectro do hamiltoniano do grafeno com deformação da massa,

$$\pm\xi_n = \pm\sqrt{n(n+2g) + M^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.20)$$

A degenerescência é tal que,

$$\pm\xi_0 = \pm M : \quad 2g, \quad n = 0 \quad (4.21)$$

$$\pm\xi_n : \quad 4(g+n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

A figura 4.1 mostra o espectro do hamiltoniano do grafeno *com* e *sem* deformação da massa. Note que mesmo sob deformação da massa o espectro continua simétrico com relação a energia zero.

Perceba que a degenerescência dos modos-zero corresponde aos autovalores $\pm M$, quando adiciona-se o parâmetro de massa. Vale ressaltar também que os operadores Dirac-Landau com deformação da massa, nos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , não respeitam a simetria quiral, ou seja, $\{-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_\pm} + M\sigma_z, \sigma_z\} \neq 0$. Todavia, $(-i\mathcal{D} + M\sigma_z)_{\mathbf{K}_+ \oplus \mathbf{K}_-}$ obedece a,

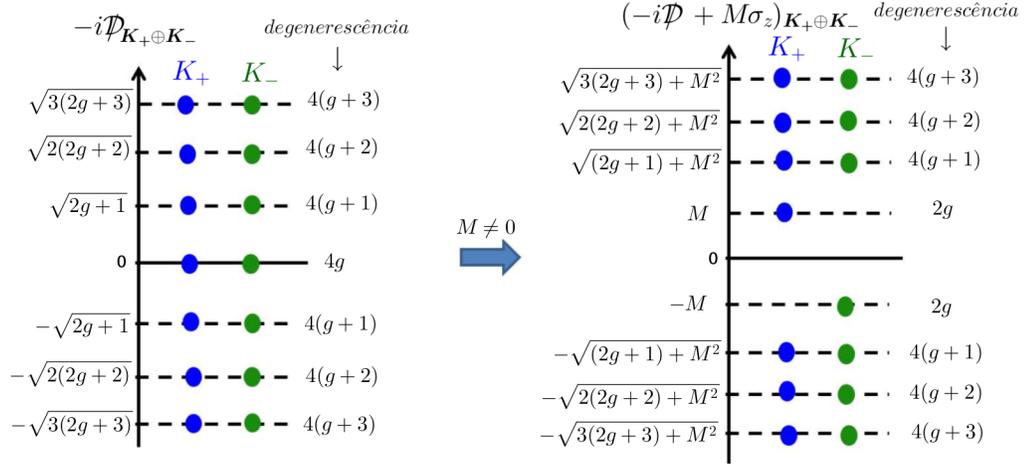
$$\{\mathcal{R}, (-i\mathcal{D} + M\sigma_z)_{\mathbf{K}_+ \oplus \mathbf{K}_-}\} = 0 \quad (4.23)$$

onde,

$$\mathcal{R} = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

Note que \mathcal{R} pode ser interpretado como uma matriz quiral generalizada, tal como vimos na seção 3.3. A relação (4.23) é o que garante a simetria do espectro do Hamiltoniano massivo, com respeito a energia zero.

Figura 4.1: Espectro do hamiltoniano do grafeno *com e sem* deformação da massa. Os pequenos círculos azul e verde, correspondem respectivamente aos autoestados dos operadores Dirac-Landau em K_+ e K_- .



Fonte: Referência [7]

Uma consequência direta de (4.23) é o fato da matriz \mathcal{R} relacionar os autoestados correspondentes aos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , tal como,

$$\Psi_{\pm\xi_n, m; \mathbf{K}_+}(M) = i\sigma_y \Psi_{\mp\xi_n, m; \mathbf{K}_-}(M) \quad (4.25)$$

As eqs. (4.23) e (4.25) são facilmente demonstradas, onde o leitor pode usar $\sigma_y(-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_+} + M\sigma_z) + (-i\mathcal{D}_{\mathbf{K}_-} + M\sigma_z) = 0$ na verificação de (4.23).

Uma vez que conhecemos os autoestados dos operadores Dirac-Landau massivos em \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- [(4.16), (4.17)], estamos aptos a introduzir as esferas fuzzy para cada vale como,

$$\mathbf{X}_{\pm\xi_n}^{\mathbf{K}_+} = \langle \Psi_{\pm\xi_n; \mathbf{K}_+}^g(M) | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\xi_n; \mathbf{K}_+}^g(M) \rangle \quad (4.26)$$

$$\mathbf{X}_{\pm\xi_n}^{\mathbf{K}_-} = \langle \Psi_{\pm\xi_n; \mathbf{K}_-}^g(M) | \mathbf{x} | \Psi_{\pm\xi_n; \mathbf{K}_-}^g(M) \rangle \quad (4.27)$$

Seguindo um procedimento análogo aquele da seção 3.3, obtemos,

$$\mathbf{X}_{\pm\xi_n}^{\mathbf{K}_+} = - \left(1 \mp \frac{M}{2g\xi_n} \right) \tau_n^{(g)} \cdot \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \quad (4.28)$$

$$\mathbf{X}_{\pm\xi_n}^{\mathbf{K}_-} = - \left(1 \pm \frac{M}{2g\xi_n} \right) \tau_n^{(g)} \cdot \mathbf{S}_{s=g+n-\frac{1}{2}} \quad (4.29)$$

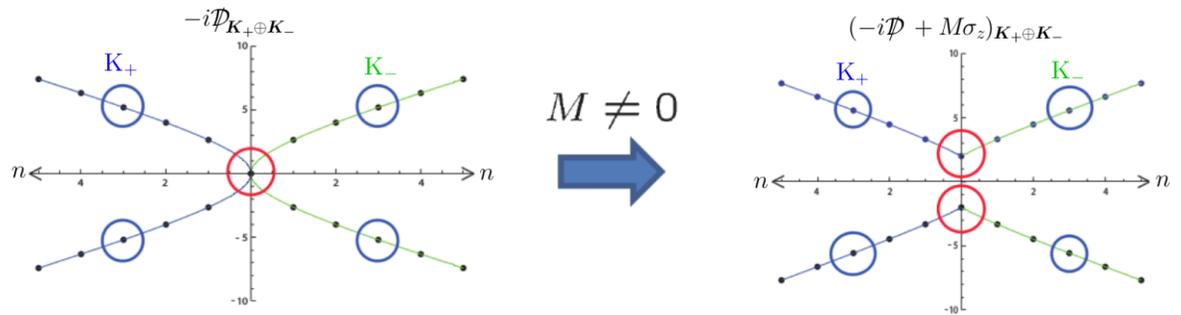
onde $\tau_n^{(g)}$ é calculado por (3.69). Então, devemos ter que,

$$\mathbf{X}_{\xi_n}^{\mathbf{K}_+} \cdot \mathbf{X}_{\xi_n}^{\mathbf{K}_+} = \mathbf{X}_{-\xi_n}^{\mathbf{K}_-} \cdot \mathbf{X}_{-\xi_n}^{\mathbf{K}_-} \equiv \mathcal{R}_{\xi_n}^{\prime(g)2} \quad (4.30)$$

$$\mathbf{X}_{-\xi_n}^{\mathbf{K}_+} \cdot \mathbf{X}_{-\xi_n}^{\mathbf{K}_+} = \mathbf{X}_{\xi_n}^{\mathbf{K}_-} \cdot \mathbf{X}_{\xi_n}^{\mathbf{K}_-} \equiv \mathcal{R}_{-\xi_n}^{\prime(g)2} \quad (4.31)$$

onde os raios das esferas fuzzy $\mathcal{R}_{\pm\xi_n}^{(g)}(M)$ já foram calculados e são dados por (3.105). As eqs. (4.30) e (4.31) nos dizem que, para um dado nível de Landau n (não nulo), o parâmetro de massa $M \neq 0$ modifica o tamanho das quatro esferas fuzzy, de modo que duas aumentam seus raios e as outras duas diminuem, em contra partida, para $n = 0$ as esferas fuzzy não variam seus tamanhos como mostra a figura 4.2 ($g = 3$ e $M = 2$ foram adotados).

Figura 4.2: Mudança nos tamanhos das esferas fuzzy (representadas pelos círculos) sob deformação da massa nos níveis de Landau correspondentes.



Fonte: Referência [7]

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Iniciamos esta dissertação estudando as propriedades eletrônicas do grafeno, no limite do contínuo a baixas energias. Vimos que neste material, os portadores de carga (elétrons) apresentam relação de dispersão linear para o espectro de energia e se comportam como partículas de Dirac livres, sendo descritos pela equação de Dirac, sem massa em $2 + 1$ dimensões.

Vimos no capítulo 2, que defeitos topológicos num cristal (ideal), podem ser descritos por meio de métricas de uma geometria com curvatura e torsão, isto é, uma geometria de Einstein-Cartan. Em seguida, fizemos uma breve análise dos defeitos tipo desclinações, usando a teoria elástica de defeitos e depois via campos de gauge, onde mostramos que desclinações estão associadas a curvatura da rede, sendo esta última medida pelo vetor de Frank [3]. Por outro lado, tais tipos de defeitos têm como consequência a mistura dos espinores correspondendo a sítios da mesma sub-rede no grafeno, e vimos que tal mistura é descrita por um gauge não-Abeliano, dependente somente da topologia da rede.

No capítulo 3, estudamos os modelos de Landau relativísticos e a geometria não-comutativa, sendo esta última derivada por aplicação ao método de projeção de nível aos modelos relativísticos de Landau. Analisamos o problema de autovalores do operador Dirac-Landau sobre uma esfera, e vimos que seus autoestados com autovalores de sinais opostos estão relacionados pela transformação quiral σ_z , uma vez que a simetria quiral (3.39) é satisfeita. Introduzimos as esferas fuzzy relativísticas e não-relativísticas por meio dos autoestados dos níveis de Landau relativísticos e não-relativísticos. Mostramos que, em comparação com o caso não-relativístico, os raios das esferas fuzzy relativísticas diminuem para $n = 0$ (modos-zero) (3.75) e para $n \neq 0$ eles aumentam (3.76). Notamos também que, sob deformação da massa, para níveis de Landau simétricos, os raios das esferas fuzzy variam seus tamanhos,

enquanto que para modos-zero não varia (ver fig. 3.5).

No capítulo 4, aplicamos todo o arcabouço teórico visto sobre níveis de Landau relativísticos e esferas fuzzy no grafeno. Uma vez que lidamos com os graus de liberdade dos vales, notamos que a degenerescência de cada nível relativístico de Landau é o dobro (4.11) comparado ao caso de um único operador Dirac-Landau. Abordamos também, separadamente, os autovalores e as degenerescências do operador Dirac-Landau em cada vale (\mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_-), vimos que mesmo sob deformação da massa, o espectro do hamiltoniano do grafeno apresenta simetria com respeito a energia zero.

Como perspectiva, podemos usar os modelos de Landau relativísticos e esferas fuzzy para estudar o grafeno com defeito topológico tipo desclinação, onde podemos introduzir o parâmetro $\alpha = 1 \pm \frac{\lambda}{2\pi}$ na métrica da esfera S^2 . Este parâmetro descreve o setor angular λ retirado ou adicionado à superfície da esfera.

Apêndice A

Modelo de Landau Não-Relativístico

Neste apêndice faremos uma revisão do modelo de Landau não-relativístico, o qual descrevemos um sistema carga-monopolo. Este é um caso 3D em que temos uma partícula se movendo numa geometria esférica onde no centro da mesma há um monopolo cujo campo magnético radial é constante sobre a superfície da esfera. O desenvolvimento que faremos aqui é baseado principalmente nas Refs.[7, 51].

A.1 Hamiltoniano de Landau Não-Relativístico

Na descrição do sistema carga-monopolo vamos adotar o sistema de coordenadas esféricas usual,

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi \quad \text{e} \quad z = r \cos \theta \quad (\text{A.1})$$

além disso também adotaremos o formalismo de Schwinger no qual o campo de gauge 1-forma do monopolo é dado por,

$$A = g \varepsilon_{ij3} \frac{z}{r(x^2 + y^2)} x_j dx_i, \quad \text{onde} \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (\text{A.2})$$

Onde g representa a carga do monopolo (aqui estamos considerando $g \geq 0$). Da eq. (A.2) e usando (A.1) obtemos as componentes,

$$\begin{aligned} A_x &= g \frac{z}{r(x^2 + y^2)} y = g \frac{1}{r} \cot \theta \sin \phi \\ A_y &= -g \frac{z}{r(x^2 + y^2)} x = -g \frac{1}{r} \cot \theta \cos \phi \\ A_z &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

É conveniente expressarmos A em coordenadas esféricas, temos então que,

$$\begin{aligned} A &= g \frac{z}{r(x^2 + y^2)} (x_2 dx_1 - x_1 dx_2) \\ &= -g \cos \theta d\phi \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

ou seja, só existe componente do campo de gauge na direção $\hat{\phi}$, que está em concordância com a simetria do sistema. Notemos, por outro lado, que o gauge adotado apresenta uma singularidade sobre o eixo z , pois em $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$ temos $\sin \theta = \sin \pi = 0$ fazendo com que A_x e A_y explodam. Na linha do equador ($\theta = \frac{\pi}{2}$) o campo de gauge do monopolo é nulo.

Associado ao campo de gauge temos um campo de força que é dado por,

$$F_j = \varepsilon_{jkl} \partial_k A_l = g \frac{1}{r^3} x_j \quad \text{onde } j, k, l = 1, 2, 3. \quad (\text{A.5})$$

ou equivalentemente,

$$F = dA \quad (\text{A.6})$$

Onde o operador ‘d’ é uma derivada exterior¹ sobre a 1-forma A . De forma análoga ao caso da derivação da eq.(A.4), podemos expressar F em coordenadas esféricas, temos,

$$\begin{aligned} F &= \frac{g}{r(x^2 + y^2)} (ydz \wedge dx - xdz \wedge dy) \\ &= g \sin \theta d\theta \wedge d\phi \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

onde usamos a propriedade que $dx^i \wedge dx^i = 0$. Vemos que F é um campo 2-forma como era de se esperar. As componentes do campo de força são obtidas trivialmente a partir da eq.(A.5), donde encontramos,

$$F_x = g \frac{x}{r^3}, \quad F_y = g \frac{y}{r^3}, \quad F_z = g \frac{z}{r^3} \quad (\text{A.8})$$

A derivada covariante é construída a partir de,

$$D_j = \partial_j - iA_j \quad (\text{A.9})$$

agora ao fazermos o índice $j = r, \theta, \phi$ e notando que $A_r = A_\theta = 0$ têm-se,

$$D_r = \partial_r, \quad D_\theta = \partial_\theta \quad \text{e} \quad D_\phi = \partial_\phi - iA_\phi \quad (\text{A.10})$$

mas pela eq.(A.4),

$$D_\phi = \partial_\phi + ig \cos \theta \quad (\text{A.11})$$

¹Veja [52] para mais detalhes.

por outro lado, o momento angular covariante é dado por,

$$\Lambda_j^{(g)} = -i\varepsilon_{jkl}x_k D_l \quad (\text{A.12})$$

que podem ser expressos tanto em coordenadas cartesianas quanto esféricas, assim, reescrevendo (A.12),

$$\Lambda_j^{(g)} = -i(\varepsilon_{j12}x_1 D_2 + \varepsilon_{j13}x_1 D_3 + \varepsilon_{j21}x_2 D_1 + \varepsilon_{j23}x_2 D_3 + \varepsilon_{j31}x_3 D_1 + \varepsilon_{j32}x_3 D_2)$$

calculamos a componente² Λ_1 , logo,

$$\begin{aligned} \Lambda_1^{(g)} &= -iy \left(\frac{\partial}{\partial z} - iA_z \right) + iz \left(\frac{\partial}{\partial y} - iA_y \right) \\ &= L_1^{(0)} - g \frac{\cos^2 \theta}{\text{sen } \theta} \cos \phi, \quad \text{onde} \quad L_1^{(0)} = -i\varepsilon_{1kl}x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \end{aligned}$$

De forma análoga calculamos as outras duas componentes, destacamos então,

$$\Lambda_x^{(g)} = L_x^{(0)} - g \frac{z^2 x}{r(x^2 + y^2)} = L_x^{(0)} - g \frac{\cos^2 \theta}{\text{sen } \theta} \cos \phi \quad (\text{A.13})$$

$$\Lambda_y^{(g)} = L_y^{(0)} - g \frac{z^2 y}{r(x^2 + y^2)} = L_y^{(0)} - g \frac{\cos^2 \theta}{\text{sen } \theta} \text{sen } \phi \quad (\text{A.14})$$

$$\Lambda_z^{(g)} = L_z^{(0)} + g \frac{z}{r} = L_z^{(0)} - g \cos \theta \quad (\text{A.15})$$

Os termos $L_j^{(0)}$ são os operadores de momento angular orbital livre e obedecem a forma,

$$L_j^{(0)} = \varepsilon_{jkl}x_k \partial_l, \quad \text{onde usamos} \quad \partial_l \equiv \frac{\partial}{\partial x_l} \quad (\text{A.16})$$

As eqs. (A.16) também podem ser postas em coordenadas esféricas, faremos explicitamente o caso $L_x^{(0)}$ e as outras duas podem ser obtidas seguindo um procedimento análogo, temos,

$$\begin{aligned} L_x^{(0)} &= -i \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{1kl}x_k \partial_l \\ &= -i \sum_k^3 \left(\varepsilon_{1k1}x_k \frac{\partial}{\partial x_1} + \varepsilon_{1k2}x_k \frac{\partial}{\partial x_2} + \varepsilon_{1k3}x_k \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \\ &= i(\text{sen } \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) \end{aligned}$$

onde fizemos uso dos operadores $\frac{\partial}{\partial x_i}$ em coordenadas esféricas³.

²Note que estamos usando a seguinte convenção para os índices: 1,2,3 equivalem a x, y, z , respectivamente.

³Veja o exercício 2.5.12 da ref.[53].

O conjunto das três eqs. (A.16) são escritas como,

$$L_x^{(0)} = i(\text{sen } \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) \quad (\text{A.17})$$

$$L_y^{(0)} = -i(\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \text{sen } \phi \partial_\phi) \quad (\text{A.18})$$

$$L_z^{(0)} = -i\partial_\phi \quad (\text{A.19})$$

A partir do campo de força (A.5) e do momento angular covariante (A.12), calculamos o momento angular total $SU(2)$,

$$\mathbf{L}^{(g)} = \mathbf{\Lambda}^{(g)} - g \frac{\mathbf{x}}{r} \quad (\text{A.20})$$

Após algum trabalho algébrico pode-se organizar as componentes de $\mathbf{L}^{(g)}$ como,

$$L_x^{(g)} = i(\text{sen } \phi D_\theta + \cot \theta \cos \phi D_\phi) - g \frac{x}{r} \quad (\text{A.21})$$

$$L_y^{(g)} = -i(\cos \phi D_\theta - \text{sen } \phi \cot \theta D_\phi) - g \frac{y}{r} \quad (\text{A.22})$$

$$L_z^{(g)} = -iD_\phi - g \frac{z}{r} \quad (\text{A.23})$$

Por motivos que ficarão óbvios mais a frente, vamos reescrever as eqs. [(A.21)-(A.23)] de uma maneira mais sugestiva, partindo de (A.20) e usando (A.1). Como de costume o farei para a 1^a componente, sendo as outras obtidas analogamente:

$$\begin{aligned} L_x^{(g)} &= L_x^{(0)} - g \frac{\cos^2 \theta}{\text{sen } \theta} \cos \phi - g \frac{x}{r} \\ &= L_x^{(0)} - g \frac{r}{x^2 + y^2} x \end{aligned}$$

Temos que,

$$L_x^{(g)} = L_x^{(0)} - g \frac{r}{x^2 + y^2} x = L_x^{(0)} - g \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \quad (\text{A.24})$$

$$L_y^{(g)} = L_y^{(0)} - g \frac{r}{x^2 + y^2} y = L_y^{(0)} - g \frac{\text{sen } \phi}{\text{sen } \theta} \quad (\text{A.25})$$

$$L_z^{(g)} = L_z^{(0)} = -i\partial_\phi \quad (\text{A.26})$$

O objetivo agora é calcular o quadrado do operador momento angular total (A.20) e para tanto vamos usar as eqs. [(A.24)-(A.26)], além de considerar uma função teste⁴ $h(\theta, \phi)$, onde obtemos,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^{(g)2} h &= \left(L_x^{(g)2} + L_y^{(g)2} + L_z^{(g)2} \right) h \\ &= \left[\mathbf{L}^{(0)2} + 2g \frac{rz}{x^2 + y^2} L_z^{(0)} + g^2 \frac{r^2}{x^2 + y^2} \right] h \end{aligned}$$

⁴Geralmente quando queremos saber a forma de um operador, fazemos o mesmo agir numa função teste e depois descartamos esta última onde ficamos com uma equação envolvendo os operadores apenas. Veja a ref. [50].

E identificamos imediatamente que,

$$\mathbf{L}^{(g)2} = \mathbf{L}^{(0)2} + 2g \frac{rz}{x^2 + y^2} L_z^{(0)} + g^2 \frac{r^2}{x^2 + y^2} \quad (\text{A.27})$$

onde,

$$\mathbf{L}^{(0)2} = -\frac{1}{\text{sen } \theta} \partial_\theta (\text{sen } \theta \partial_\theta) - \frac{1}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi^2 \quad (\text{A.28})$$

Pode-se mostrar que os operadores (A.26) e (A.27) comutam, e da mecânica quântica não-relativística, eles possuem autoestados simultâneos⁵. Isto sugere então os seguintes problemas de autovalores:

$$\mathbf{L}^{(g)2} \mathcal{Y}_{\ell,m}^g = \ell(\ell + 1) \mathcal{Y}_{\ell,m}^g \quad (\text{A.29})$$

$$L_z^{(g)} \mathcal{Y}_{\ell,m}^g = m \mathcal{Y}_{\ell,m}^g \quad (\text{A.30})$$

onde as funções $\mathcal{Y}_{\ell,m}^g$ são chamadas *harmônicos monopolares* e os números quânticos ℓ e m são dados por [51]:

$$\ell = g + n, \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.31})$$

$$m = -\ell, \dots, \ell \quad (\text{A.32})$$

Uma vez que estamos tratando com operadores tipo momento angular, é conveniente trabalhar com os operadores não-Hermitianos,

$$L_\pm^{(g)} = L_x^{(g)} \pm i L_y^{(g)} \quad (\text{A.33})$$

que são chamados operadores *escada*. Pelas eqs. [(A.17),(A.18),(A.24),(A.25)] reescrevemos $L_+^{(g)}$ como:

$$\begin{aligned} L_+^{(g)} &= \left[i (\text{sen } \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) - g \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \right] + i \left[-i (\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \text{sen } \phi \partial_\phi) - g \frac{\text{sen } \phi}{\text{sen } \theta} \right] \\ &= e^{i\phi} \left(\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi - \frac{g}{\text{sen } \theta} \right) \end{aligned}$$

Ao calcular para $L_-^{(g)}$ as eqs. (A.33) ficam escritas como,

$$L_\pm^{(g)} = e^{\pm i\phi} \left(\pm \partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi - \frac{g}{\text{sen } \theta} \right) \quad (\text{A.34})$$

A ação dos operadores escada sobre os harmônicos monopolares produz,

$$L_\pm^{(g)} \mathcal{Y}_{\ell,m}^g = \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} \mathcal{Y}_{\ell,m \pm 1}^g \quad (\text{A.35})$$

⁵Consulte J. J. Sakurai [54].

como era de se esperar, $L_{\pm}^{(g)}$ modificam o autovalor de $L_z^{(g)}$ por uma unidade, mas não afetam o autovalor correspondente a $\mathbf{L}^{(g)^2}$.

Os harmônicos monopulares são explicitamente dados por [51, 7]:

$$\mathcal{Y}_{\ell,m}^g = \sqrt{\frac{1}{4\pi} \frac{(2\ell+1)(\ell-m)!(\ell+m)!}{(\ell-g)!(\ell+g)!}} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{-\alpha} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{-\beta} \times P_{\ell+m}^{(-\alpha,-\beta)}(\cos \theta) \cdot e^{im\phi} \quad (\text{A.36})$$

onde,

$$\alpha = m + g, \quad \beta = m - g \quad (\text{A.37})$$

e $P_n^{(a,b)}(\cos \theta)$ são os polinômios de Jacobi.⁶ Vale ressaltar que o número quântico magnético m deve ser inteiro ($m \in \mathbb{Z}$) para a unicidade da função de onda. Por outro lado, isto implica que g também seja inteiro [veja eqs. (A.31) e (A.32)].

Alternativamente, podemos expressar os polinômios de Jacobi como [6],

$$P_{\ell+m}^{(-m-g,-m+g)}(\cos \theta) = (-1)^{\ell+m} \sum_{n=0}^{\ell+m} (-1)^n \binom{\ell-g}{n} \binom{\ell+g}{g-m+n} \times \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{2\ell+2m-2n} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{2n} \quad (\text{A.38})$$

e substituindo (A.38) em (A.36), obtêm-se,

$$\mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi) = (-1)^{\ell+m} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!(\ell-m)!}{4\pi(\ell+g)!(\ell-g)!}} e^{im\phi} \sum_n (-1)^n \binom{\ell-g}{n} \binom{\ell+g}{g-m+n} \times \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{2\ell-2n-g+m} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{2n+g-m} \quad (\text{A.39})$$

A tabela abaixo mostra os harmônicos monopulares para $g = \ell = 1$,

g	ℓ	m	$\mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi)$
1	1	-1	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi}$
1	1	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) (\cos \theta - 1)$
1	1	1	$\frac{1}{8} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{(1-\cos \theta)^2}{\sin^2(\theta/2)} e^{i\phi}$

⁶Os polinômios de Jacobi são definidos (fazendo $x = \cos \theta$) pela fórmula de Rodrigues:

$$P_n^{(a,b)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-a} (1+x)^{-b} \frac{d^n}{dx^n} (1-x)^{n+a} (1+x)^{n+b}$$

onde $x \in [-1, 1]$. Uma discussão detalhada sobre estes polinômios pode ser encontrada em [6].

É interessante notar que o caso $g = 0 \rightarrow \alpha = \beta = m$ e os polinômios de Jacobi (veja a nota de rodapé 6) assumem a forma [51],

$$P_{\ell+m}^{-m,-m}(\cos \theta) = \frac{(-1)^m}{2^m} \frac{\ell!}{(\ell+m)!} (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} P_\ell^m(\cos \theta) \quad (\text{A.40})$$

onde $P_\ell^m(\cos \theta)$ é a função de legendre associada. Assim, substituindo (A.40) em (A.36) recuperamos os harmônicos esféricos⁷ usuais:

$$\mathcal{Y}_{\ell,m}^0(\theta, \phi) \equiv \mathcal{Y}_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (\text{A.41})$$

O hamiltoniano de Landau não-relativístico de uma partícula na presença do campo do monopolo é dado por [7, 56],

$$\begin{aligned} \text{H} &= -\frac{1}{2M} \sum_{j=1}^3 D_j^2 \\ &= -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{Mr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2Mr^2} \mathbf{\Lambda}^{(g)2} \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

onde usamos as relações para $\frac{\partial}{\partial x_j}$ em coordenadas esféricas e as componentes do campo de gauge (A.3).

Considerando agora que a esfera do modelo tenha raio unitário ($r = 1$), e usando a relação $\mathbf{L}^{(g)2} = \mathbf{\Lambda}^{(g)2} + g^2$, o hamiltoniano da partícula sobre a esfera será,

$$\text{H}^{(g)} = \frac{1}{2M} \mathbf{\Lambda}^{(g)2} = \frac{1}{2M} (\mathbf{L}^{(g)2} - g^2) \quad (\text{A.43})$$

Notemos, por outro lado, que $\text{H}^{(g)}$ e $\mathbf{L}^{(g)2}$ são *observáveis compatíveis*, portanto possuem $\mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi)$ como autoestados simultâneos. Temos então o problema de autovalores:

$$\text{H}^{(g)} \mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi) = E \mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi) \quad (\text{A.44})$$

que é facilmente resolvido usando-se as eqs.(A.29, A.31), obtem-se,

$$E_n^{(g)} = \frac{1}{2M} [n(n+1) + g(2n+1)] \quad (\text{A.45})$$

Esta última equação nos mostra que para o n -ésimo nível de Landau, os autoestados (harmônicos monopulares) são *degenerados*, cuja degenerescência é,

$$2\ell + 1 = 2g + 2n + 1 \quad (\text{A.46})$$

⁷Os harmônicos esféricos são definidos por:

$$\mathcal{Y}_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

veja mais propriedades em [55].

A.2 Relações com os operadores Edth

Vimos que para o número quântico m existem operadores escada que denotamos por $L_{\pm}^{(g)}$ responsáveis por aumentar ou diminuir o valor deste número em 1 unidade. Na literatura constatou-se que também existem operadores escada para g , estes conhecidos como *operadores edth* [7, 57]:

$$\tilde{\partial}_+^{(g)} \equiv (\text{sen } \theta)^g \left(\partial_\theta + i \frac{1}{\text{sen } \theta} \partial_\phi \right) (\text{sen } \theta)^{-g} \quad (\text{A.47})$$

$$\tilde{\partial}_-^{(g)} \equiv (\text{sen } \theta)^{-g} \left(\partial_\theta - i \frac{1}{\text{sen } \theta} \partial_\phi \right) (\text{sen } \theta)^g \quad (\text{A.48})$$

Usando a função teste $f(\theta, \phi)$ os operadores Edth podem ser expressos como,

$$\tilde{\partial}_\pm^{(g)} = \partial_\theta \mp g \cot \theta \pm i \frac{1}{\text{sen } \theta} \partial_\phi \quad (\text{A.49})$$

A ação dos operadores edth sobre os harmônicos monopulares produz [58, 59],

$$\tilde{\partial}_\pm^{(g)} \mathcal{Y}_{\ell, m}^g(\theta, \phi) = \pm \sqrt{(\ell \mp g)(\ell \pm g + 1)} \mathcal{Y}_{\ell, m}^{g \pm 1}(\theta, \phi) \quad (\text{A.50})$$

As eqs. (A.50) nos mostram que $\tilde{\partial}_+^{(g)}/\tilde{\partial}_-^{(g)}$ aumenta/diminui a carga do monopolo em 1 unidade. Em contrapartida, em termos dos níveis de Landau (A.31), os operadores edth atuam como operadores escada dos níveis sendo que: $\tilde{\partial}_+^{(g)}/\tilde{\partial}_-^{(g)}$ diminui/aumenta o nível n em 1 unidade.

Usando as eqs. [(A.48),(A.49)] e a função teste $f(\theta, \phi)$ obtemos as seguintes relações para os operadores edth,

$$\tilde{\partial}_+^{(g-1)} \tilde{\partial}_-^{(g)} - \tilde{\partial}_-^{(g+1)} \tilde{\partial}_+^{(g)} = -2g \quad (\text{A.51})$$

$$\tilde{\partial}_+^{(g-1)} \tilde{\partial}_-^{(g)} + \tilde{\partial}_-^{(g+1)} \tilde{\partial}_+^{(g)} = -2(\mathbf{L}^{(g)2} - g^2) \quad (\text{A.52})$$

Agora das eqs. [(A.24),(A.26),(A.48),(A.49)] pode-se verificar que os operadores edth e momento angular são mutuamente comutativos, isto é, que as relações abaixo são válidas,

$$L_j^{(g+1)} \tilde{\partial}_+^{(g)} - \tilde{\partial}_+^{(g)} L_j^{(g)} = 0 \quad (\text{A.53})$$

$$L_j^{(g-1)} \tilde{\partial}_-^{(g)} - \tilde{\partial}_-^{(g)} L_j^{(g)} = 0 \quad (\text{A.54})$$

onde $j = x, y, z$. Para $j = x$, após algum trabalho algébrico, obtemos:

$$\begin{aligned} (L_x^{(g+1)} \tilde{\partial}_+^{(g)} - \tilde{\partial}_+^{(g)} L_x^{(g)}) f &= g^2 \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \cos \phi f - g^2 \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \cos \phi f + g \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \cos \phi f - g \frac{\cos \theta}{\text{sen}^2 \theta} \cos \phi f \\ &\quad - g \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \partial_\theta f - \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \partial_\theta f + \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \partial_\theta f - ig \frac{\cos \phi}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi f + ig \frac{\cos \phi}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi f \\ &\quad - i \frac{\cos \phi}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi f + i \frac{\cos \phi}{\text{sen}^2 \theta} \partial_\phi f + g \frac{\cos \phi}{\text{sen } \theta} \partial_\theta f \\ &= 0f \end{aligned}$$

Analogamente, calcula-se para as outras componentes. O fato de os operadores edth e momento angular total comutarem implica que aqueles são *singletos*⁸ sob transformações causadas por estes.

Usando as relações (A.51, A.52) podemos reescrever o Hamiltoniano de Landau (A.43) como,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(g)} &= -\frac{1}{4M}(\partial_+^{(g-1)}\partial_-^{(g)} + \partial_-^{(g+1)}\partial_+^{(g)} + 2g - 2g) \\ &= -\frac{1}{2M}\partial_+^{(g-1)}\partial_-^{(g)} - \frac{g}{2M} \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

O leitor pode verificar que devido (A.53) e (A.54) o Hamiltoniano (A.55) é invariante sob transformações SU(2), isto é,

$$[\mathbf{H}^{(g)}, L_j^{(g)}] = 0 \quad \text{com} \quad j = x, y, z. \quad (\text{A.56})$$

É interessante notarmos que a eq. (A.45) também pode ser derivada usando o hamiltoniano de Landau na forma (A.55) e as eqs. (A.50), uma vez que $\mathcal{Y}_{\ell,m}^g(\theta, \phi)$ é autofunção de $\mathbf{H}^{(g)}$. Analogias com o caso plano podem ser encontradas em [7].

⁸Operadores singletos são aqueles que atuam em estados singletos, por exemplo, num sistema de duas partículas com spin $1/2$, o estado singlete é aquele cujo autovalor do quadrado do spin total \mathbf{S}^2 é nulo. Consulte, por exemplo, a pág. 166 da ref.[50].

Referências Bibliográficas

- [1] J. Amaro, “Anéis Quânticos no Grafeno na Presença de Defeitos Topológicos,” dissertação de mestrado, UFPB, (2013).
- [2] M. Jannaira, “Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos,” tese de doutorado, UFPB, (2011).
- [3] E. Cavalcante, “Aspectos Geométricos da Molécula de Fulereno em Referenciais Não-Inerciais,” tese de doutorado, UFPB, (2015).
- [4] A. Eduardo, “Anomalias e números fermiônicos induzidos em grafeno com deformações,” tese de doutorado, UNESP, (2016).
- [5] R. Dourado, “Estudo de Impurezas de Carbono em Nanoestruturas de BN”, dissertação de mestrado, UFPB, (2008).
- [6] E. Xavier e C. Fátima, “Polinômios Ortogonais e Similares: Propriedades e Aplicações,” notas de aula, versão 2.3 (2007).
- [7] K. Hasebe, “Relativistic Landau Models and Generation of Fuzzy Spheres,” *Int. J. Mod. Phys. A* **31** 1650117 (2016); [arXiv:1511.04681 - [hep-th]].
- [8] Class for Physics, Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2010. “Graphene”. The Royal Swedish Academy of Sciences.
- [9] R. R. Nair, P. Blake, U. M. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres and A. K. Geim, “Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Grafene,” *Science*, **320** 1308 (2008).
- [10] C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar and J. Hone, “Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene,” *Science*, **321** 385 (2008).
- [11] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak and A. K. Geim, “Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer,” *Phys. Rev.* **100** 016602-016605 (2008).

- [12] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao and C. N. Lau, "Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene," *Nano. Lett.* **8** 902-907 (2008).
- [13] A. K. Geim, K. S. Novoselov, "The rise of graphene," *Nature. Mat.* **6** 183-191 (2007).
- [14] P. Lambin and J. Fink, "Electronic states of carbon materials," *Ency. of Cond. Matt. Phys.* **1** 142-151 (Elsevier Science, 2005).
- [15] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, "C60: Buckminsterfullerene," *Nature.* **318** 162 (1985).
- [16] S. Iijima, "Helical Microtubules of Graphitic Carbon," *Nature.* **354** 56 (1991).
- [17] K. S. Novoselov, A. K. Geim *et al*, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Science*, **306** 666-669 (2004).
- [18] Y. Zhang, Y. Tan, H. L. Stormer and P. Kim, "Experimental Observation of the Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene," *Nature.* **438** 201-204 (2005).
- [19] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos and A. A. Firsov, "Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene" *Nature.* **438** 197-200 (2005).
- [20] A. J. M. Giesbers, U. Zeitler, M. I. Katsnelson, L. A. Ponomarenko, T. M. G. Mohiuddin and J. C. Maan *Phys*, "Quantum-Hall Activation Gaps in Graphene," *Phys. Rev. Lett.* **99** 206803 (2007).
- [21] P. E. Lammert and V. H. Crespi, "Classification By Fictitious Flux and Electronic Properties," *Phys. Rev. B* **69** 035406 (2004).
- [22] D. V. Kolesnikov and V. A. Osipov, "The continuum Gauge Field-Theory Model for Low-Energie Electronic States of Icosahedral Fullerenes," *Eur. Phys. J. B* **49** 465-470 (2006).
- [23] N. D. Birrel, P. C. W. Davies, "Quantum Fields in Curved Spaces", Cambridge (1982).
- [24] L. M. P. Martinez, S. M. Torres, H. T. Gomes and A. M. T. Silva, "Nanotubos e Grafeno: Os Primos Mais Jovens na Família do Carbono!," *Qui.* **128** 21-27 (2013).

- [25] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, “Detection of Individual Gas Molecules Adsorbed on Graphene,” *Nat. Mater.* **6** 652-655 (2007).
- [26] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, “Hydrogen on Graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations,” *Phys. Rev. B* **77** 035427 (2008).
- [27] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid State Physics”, College Edition, EUA: Harcour, Inc. (1976).
- [28] F. Guinea and M. Vozmediano, “The Electronic Spectrum of Fullerenes From the Dirac Equation,” *Nucl. Phys. B* **406** 771-794 (1993).
- [29] G. W. Semenoff, “Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly,” *Phys. Rev.* **53**.
- [30] A. N. Castro, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov and A. Geim, “The Electronic Properties of Graphene,” *Phys. Rev. Mod.* **81** 109 (2009).
- [31] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov and R. A. Duine, “New Perspective for Rashba Spin-Orbit Coupling,” *Nat. Mater.* **14**, 871-882 (2015).
- [32] W. Heisenberg, “Über den Bau der Atomkerne.I,” *Z. Phys.* vol.77 p.1 (1932).
- [33] J. C. Mayer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth and S. Roth, “The Structure of Suspended Graphene Sheets,” *Nat.* **446** 60-63 (2007).
- [34] S. Carrol, “Spacetime and Geometry - An Introduction to General Relativity,” Addison Wesley, (2004).
- [35] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, “Theory of Elasticity,” 2^o ed., Pergamon Press (1970).
- [36] H. Kleinert, “Gauge Fields in Condensed Matter, Vol. II - Stresses and Defects,” World Scientific, Singapore(1989).
- [37] M. O. Katanaev and I. V. Volovich, *Ann. Phys.* **216** 1-28 (1992).
- [38] M. O. Katanaev, [arXiv: cond-mat/0407469] (2005).
- [39] R. A. Puntingan and H. H. Soleng, “Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects,” *Class. Quant. Grav.* **14** 1129-1149 (1997).

- [40] R. M. Wald, “General Relativity,” Chicago. Pres. (1998).
- [41] C. W. Misner, K. S. Thorne, J. A. Wheeler and W. H. Freeman, “Gravitation,” New York (1973).
- [42] M. Nakahara, “Geometry, Topology and Physics,” Institute of Physics. Publishing Bristol (2013).
- [43] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson and F. Guinea, “Gauge fields in graphene,” Phys. Rep. **496** 109-148 (2010).
- [44] P. E. Lammert and V. H. Crespi, Phys. Rev. B **69** 035406 (2004).
- [45] J. Gonzalez, F. Guinea and M. A. H. Vozmediano, “Continuum approximation of Fullerene molecules,” Phys. Rev. Lett. **69** 172 (1992).
- [46] D. Lee, “The surface states of topological insulators - Dirac fermion in curved two dimensional spaces,” Phys. Rev. B **103** 196804 (2009); [arXiv:0908.2490].
- [47] K. Imura, Y. Yoshimura, Y. Takane, T. Fukui, “Spherical topological insulator,” Phys. Rev. B **86** 235119 (2012); [arXiv:1205.4878].
- [48] K. Hasebe, “Higher Dimensional Quantum Hall Effect as A-Class Topological Insulator,” Nucl. Phys. B **886** 952-1002 (2014); [arXiv:1403.5066].
- [49] Y. Li, K. Intriligator, Y. Yu and C. Wu, “Isotropic Landau levels of Dirac fermions in high dimensions,” Phys. Rev. B **85** 085132 (2012); [arXiv:1108.5650].
- [50] D. J. Griffiths, “Introduction to Quantum Mechanics,” New Jersey, EUA: Prentice Hall, Inc. (1995) 33 p.
- [51] T. T. Wu, C. N. Yang, “Dirac Monopoles without Strings: Monopoles Harmonics,” Nucl. Phys. B **107** 365-380 (1976).
- [52] S. M. Carroll, “Lectures Notes on General Relativity,” [arXiv:gr-qc/9712019v1] (1997) 22 p.
- [53] G. B. Arfken e H. J. Weber, “Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física,” Tradução da sexta edição. Elsevier Editora Ltda (2007).
- [54] J. J. Sakurai, “Modern Quantum Mechanics,” Rev. Edition, USA: Addison-Wesley (1994) 30 p.
- [55] W. Greiner and D. A. Bromley, “Quantum Mechanics: An Introduction,” 4^a Ed. Berlin, Germany: Springer-Verlag (2000) 106 p.

- [56] F. D. M. Haldane, “Fractional Quantization of the Hall Effect: A Hierarchy on Incompressible Quantum Fluid States,” *Phys. Rev. Lett.* **51** 605-608 (1983).
- [57] E. T. Newman and R. Penrose, “Note on the Bondi-Metzner-Sachs Group,” *J. Math. Phys.* **7** 863 (1966).
- [58] T. Dray, “The relationship between monopole harmonics and spin-weighted spherical harmonics,” *J. Math. Phys.* **26** 1030-1033 (1985).
- [59] T. Dray, “A unified treatment of Wigner D functions, spin-weighted spherical harmonics, and monopole harmonics,” *J. Math. Phys.* **27** 781-792 (1986).
- [60] B. P. Dolan, “The Spectrum of the Dirac Operator on Coset Spaces with Homogeneous Gauge Fields,” *JHEP* **18** 305 (2003).
- [61] K. Hasebe, “Hopf Maps, Lowest Landau Level, and Fuzzy Spheres,” *SIGMA*. **6** 71 (2010); [arXiv:1009.1192].
- [62] J. Hoppe, “Quantum Theory of a Massless Relativistic Surface and a Two-dimensional Bound State Problem,” MIT PhD Thesis (1982).
- [63] J. Hoppe, “Membranes and integrable systems,” *Phys. Lett. B* **250** 44-48 (1990).
- [64] J. Madore, “The Fuzzy Sphere,” *Class. Quant. Grav.* **9** 69 (1992).
- [65] T. T. Wu, C. N. Yang, “Some properties of monopole harmonics,” *Phys. Rev. D* **16** 1018 (1977).
- [66] X-L. Qi, T. Hughes and S-C. Zhang, “Topological Field Theory of TR Invariant Insulators,” *Phys. Rev. B* **78** 195424-43 (2008); [arXiv:0802.3537].
- [67] Y. Hatsugai, T. Morimoto, T. Kawarabayashi, Y. Hamamoto and H. Aoki, “Chiral symmetry and its manifestation in optical responses in graphene: interaction and multi-layers,” *New J. Phys.* **15** 035023 (2013); [arXiv:1210.0714].
- [68] A. A. Abrikosov Jr, “Dirac operator on the Riemann sphere”; [hep-th/0212134].
- [69] A. A. Abrikosov Jr, “Fermion States on the Sphere S^2 ,” *Int. J. Mod. Phys. A* **17** 885-889 (2002); [hep-th/0111084].
- [70] U. Sodré, “Exponencial de uma matriz,” Arquivo: expA.tex, Londrina-PR, (2001).
- [71] S. Meehan, “Group Theory and the $SO(3,1)$ Lorentz Group,” (2009).

-
- [72] J. K. Pachos, *Contemp. Phys.* **50** 375 (2009).
- [73] M. S. Dresselhaus and P. C. Eklund, “Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes,” USA, Academic Press, vol. 1, pp. 110-129.
- [74] J. Cami, [arXiv 1210.1730 v1 [astro-ph.GA]] (2012).
- [75] A. Verkhovtsev, A. V. Korol and A. V. Solov'yov, [arXiv 1202.6211 v2 [physics.atm-clus]] (2012).
- [76] G. Brinkmann, J. Goedgebeur and B. D. McKay, [arXiv 1207.7010 v2 [math.CO]] (2012).