

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



José Amaro da Silva Neto

Anéis Quânticos em Grafeno na Presença de Defeitos
Topológicos

João Pessoa - PB

2013

JOSÉ AMARO DA SILVA NETO

ANÉIS QUÂNTICOS NO GRAFENO NA PRESENÇA DE DEFEITOS
TOPOLÓGICOS

Dissertação submetida ao Departamento
de Física da Universidade Federal da
Paraíba, como parte dos requisitos para
obtenção do Título de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. CLAUDIO BENEDITO SILVA FURTADO

João Pessoa - PB

2013

JOSÉ AMARO DA SILVA NETO

ANÉIS QUÂNTICOS NO GRAFENO NA PRESENÇA DE DEFEITOS
TOPOLÓGICOS

Dissertação submetida ao Departamento
de Física da Universidade Federal da
Paraíba, como parte dos requisitos para
obtenção do Título de Mestre.

Aprovada em Março de 2013.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Claudio Furtado Silva Furtado - Orientador
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Sergio Andre Fontes Azevedo
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Carlos Alberto Lima Ribeiro
Universidade Estadual de Feira de Santana

João Pessoa-PB

2013

Ata da Sessão Pública da Defesa de
Dissertação de **Mestrado** do aluno **José
Amaro da Silva Neto**, candidato ao
Título de Mestre em Física na Área de
Concentração Física da Matéria
Condensada.

1 Aos vinte e cinco dias do mês de março do ano de dois mil e treze, às 14:00, 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 da
5 Matéria Condensada, **José Amaro da Silva Neto**. A comissão examinadora composta
6 pelos professores doutores: Claudio Benedito da Silva Furtado (DF/UFPB), orientador e
7 presidente da banca examinadora, Sérgio André Fontes Azevedo (DF/UFPB) e Carlos
8 Alberto Lima Ribeiro (UEFS). Dando início aos trabalhos, o Prof. Claudio Benedito da
9 Silva Furtado comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a
10 palavra ao candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de
11 dissertação intitulado "*Anéis Quânticos no grafeno na presença de defeitos*
12 *topológicos*". Concluída a exposição, o candidato foi argüido pela Banca Examinadora
13 que emitiu o seguinte parecer: "**aprovado**". Assim sendo, deve a Universidade Federal
14 da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para
15 constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, servindo de Secretário, lavrei a presente ata
16 que vai assinada por mim mesmo e pelos membros da Banca Examinadora. João
17 Pessoa, **25 de março de 2013**.

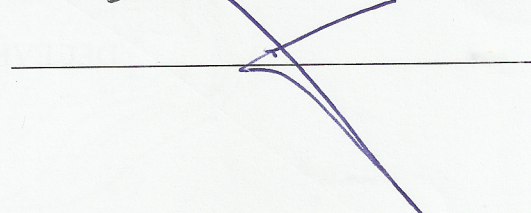
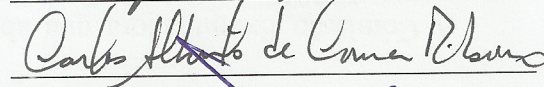
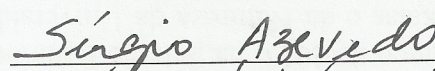
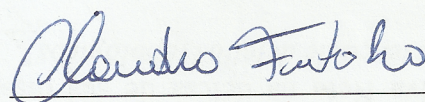
18

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

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo
UFPB

Prof. Dr. Carlos Alberto Lima Ribeiro
UEFS

Danilo Wilson Lemos Menezes
Secretário





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

DECLARAÇÃO DE TITULAÇÃO
Mestrado

A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 25 de março de 2013, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, **APROVA José Amaro da Silva Neto** na defesa de sua dissertação intitulada "*Anéis Quânticos no grafeno na presença de defeitos topológicos*".

João Pessoa, 25 de março de 2013

Orientador:

Prof. Dr. Claudio Benedito da Silva
Furtado
(UFPB)

1º Examinador:

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo
(UFPB)

2º Examinador:

Prof. Dr. Carlos Alberto Lima Ribeiro
(UEFS)

S586a Silva Neto, José Amaro da.

Anéis quânticos no grafeno na presença de defeitos topológicos / José Amaro da Silva Neto. -- João Pessoa, 2013.

82f. : il.

Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado

Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN

1. Física. 2. Grafeno. 3. Anel quântico. 4. Oscilador de Dirac. 5. Espectro de energia. 6. Defeito topológico.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

Dedico este trabalho:

a meu pai João Bosco Amaro da Silva;

à minha mãe Eliane de Oliveira Amaro;

às minhas irmãs Thalita e Raquel;

à minha companheira Luciana Dantas pela
constante motivação mesmo nos momentos
mais críticos.

Agradecimentos

Agradeço ao Deus Altíssimo, que me permitiu, por sua Graça, chegar até aqui.

Agradeço ao professor Dr. Cláudio Benedito Furtado, pelo acolhimento e confiança desde a época de aluno de graduação e estudante de iniciação científica até meu ingresso na pós-graduação. Durante este convívio sempre se mostrou como um exemplo de ser humano paciente e compreensivo ao me guiar pelas águas do conhecimento científico.

Agradeço aos professores da pós-graduação Dr. Fernando Moraes, Dr. Sérgio Azevedo, Dr. Edvaldo Nogueira, Dr. Albert Petrov e Dr. Alexandre Rosas, por contribuírem na minha formação durante todo este percurso.

Agradeço aos pós-doutorandos Dr. Knut Bakke, Dr^a. Jannaira Bueno, e aos doutorandos Jilvan Lemos de Melo, Lincon Anderson, José Fernando pelos auxílios necessários para a realização deste trabalho; Aos colegas(irmãos) de pós: Gabriel Queiroz, Thiago de Sousa, Júlio Brandão, Jardison Ricardo, Felipe Freitas e Paulo Porfírio, pela boa convivência e bom humor mesmo nas adversidades da vida. Ao Sr. Mariano, por seu bom humor e bom coração sendo um exemplo de otimismo.

Agradeço aos familiares que acolheram em suas casas, este “cabloco sonhador” que resolveu se aventurar nas águas litorâneas: Tia Edileuza e minha prima Neirilanny, cujo apoio me permitiu caminhar mais tranquilamente nesta ventura.

Agradeço aos meu pais e às minhas irmãs, por ser este porto de águas seguras na minha vida, e à minha companheira por seu entusiasmo e pela motivação que vem me dando.

Agradeço ao senhor José Gabriel da Costa, por me auxiliar na busca de Luz, Paz e Amor nestes dois anos de mestrado.

Agradeço ao Programa Nacional de Cooperação Acadêmica - CAPES que deu suporte financeiro através do Programa de Apoio a Planos de Reestruturação e Expansão das Universidades Federais -REUNI, sem o qual não seria possível concluir esta dissertação.

Lista de Figuras

2.1	Tipos de hibridizações (hibridações)[11] que ocorrem no carbono : $a)sp, b)sp^2$ e $c)sp^3$	5
2.2	Exemplos de formas alotrópicas para as diferentes hibridizações do carbono [11].	5
2.3	Monocamada de grafeno como matriz geradora de outros materiais. Da esquerda para a direita: fulereno (0-D), nanotubo (1-D) e o grafite (3-D)[1].	7
2.4	Célula unitária(losango tracejado),as duas sub-redes A (átomos brancos) e B (átomos pretos), os vetores da base no espaço direto $\mathbf{T}_1$ e $\mathbf{T}_2$ e vetores dos primeiros vizinhos $\mathbf{u}_{j=1,2,3}$ e $\mathbf{v}_{j=1,2,3}$	9
2.5	Espaço recíproco com a primeira Zona de Brillouin destacando os pontos de alta simetria Γ , K, K', e M.	10
2.6	Coordenadas Cartesianas dos pontos especiais Γ , K e M da primeira Zona de Brillouin do Grafeno	11
2.7	Estrutura de bandas do grafeno com os ponto de alta simetria Γ , M, K e K'. Ampliado em destaque um ponto de Dirac. [30]	15
3.1	Circunferência de raio r_0 no plano x-y onde o elétron está confinado.	19
3.2	Esquema do arranjo experimental.	21
3.3	Circuitos amperianos C_1 , com $r > r_a$, e C_2 com $r < r_a$	22
3.4	Espectro de energia periódico, para um elétron confinado sobre um anel 1D na presença de campo magnético. De acordo com a equação (3.18), associado aos diferentes valores do momento angular m_l temos diferentes origens.[38]	26
3.5	Regiões relacionadas a cada potencial no plano x-y. a) Representa V_2 , b) o potencial V_1 e c) a sobreposição $V = V_1 + V_2$	29

5.1	<i>Processo de Volterra</i> , em: (a) Folha de grafeno plana, com o setor angular λ (em verde). Os átomos pretos representam a sub-rede A e os brancos a sub-rede B; (b) desclinação positiva, (c) desclinação negativa.	50
-----	--	----

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	vii
Resumo	x
Abstract	xi
1 Introdução	1
2 O Grafeno Como Um Cristal Bidimensional	4
2.1 Hibridização do Carbono e Alotropia	4
2.2 Propriedades e Configuração Eletrônica do Grafeno	6
2.3 Estrutura Cristalina do Grafeno	8
2.4 Espectro de Energia e Estrutura de Bandas do Grafeno	11
2.5 Férmions Livres Sem Massa	15
3 Confinamento em Anéis Quânticos	18
3.1 Confinamento do Elétron no Anel Unidimensional(1-D)	18
3.2 Efeito Aharonov - Bohm	20
3.3 O Potencial Vetor do Anel 1-D	22
3.4 A Fase na Função de Onda	24
3.5 Correntes Persistentes	26
3.6 Confinamento do Elétron no Anel Bidimensional(2-D): O Modelo de Tan-Inkson	28

4	Confinamento de Partículas Relativísticas para um Anel 2-D	33
4.1	Oscilador de Dirac e o Acoplamento Bakke-Furtado	33
4.2	O Hamiltoniano de Dirac no Anel 2-D	34
4.3	Espectro de Energia da Partícula de Spin $1/2$	36
4.4	Correntes Persistentes para o Fluxo Aharonov-Bohm	39
4.5	O Limite Não Relativístico	40
5	Modelo de Confinamento para Quasipartículas no Grafeno	42
5.1	Nova Proposta de Acoplamento	42
5.2	Confinamento para a Folha de Grafeno Plana via Anel 2-D	43
5.2.1	O Hamiltoniano do Grafeno	43
5.2.2	Espectro de Energia da Quasipartícula	44
5.2.3	Cálculo de Correntes Persistentes na Folha Plana de Grafeno	46
5.2.4	Cálculo dos Espinores de Energia Positiva para Folha Plana de Grafeno	46
5.3	Confinamento no Anel 2-D para a Folha de Grafeno na Presença de Defeito Topológico	49
5.3.1	Espectro de Energia da Quasipartícula na Presença da Desclinação	54
5.3.2	Cálculo de Correntes Persistentes na Folha de Grafeno com Descli- nação	57
5.3.3	Cálculo dos Espinores de Energia Positiva na Folha de Grafeno com Desclinação	57
6	Conclusões e Perspectivas	61
A	A Função Hipergeométrica Confluente	63
A.1	Solução da Função Hipergeométrica	63
A.2	Limites Assintóticos da Função Hipergeométrica	64
A.3	Derivada da Função Hipergeométrica Confluente	64
A.4	Integração Envolvendo a Hiper Geométrica Conflunete	65
A.4.1	A Normalização da Função de Onda Radial	65

Resumo

O grafeno é um cristal bidimensional(2-D) semicondutor com *gap* nulo, onde os portadores de cargas se comportam como partículas sem massa. Nesta dinâmica específica, no limite de baixas energias, a relação de dispersão de energia é linear, sendo que este material pode ser descrito pela equação de Dirac sem massa contrastando com os semicondutores, cujos portadores de cargas têm massa. Neste quadro, há o problema do confinamento eletrônico no grafeno devido ao tunelamento. Para contornar esta dificuldade, é proposto um novo modelo de anel quântico, baseado no oscilador de Dirac e nos modelos de anéis de Tan-Inkson e Bakke-Furtado. A partir desse novo acoplamento, são obtidos o espectro de energia, as correntes persistentes e os espinores positivos para uma folha de grafeno com/sem defeito topológico do tipo desclinação, via equação de Dirac (2+1) sem massa

Palavras-chave: Grafeno, Anel Quântico, Oscilador de Dirac, Espectro de Energia, Correntes Persistentes, Defeito Topológico, Desclinação.

Abstract

The Graphene is a two-dimensional(2-D) semiconductor crystal with null gap, where charge carriers behave as massless particles. In this specific dynamics in the limit of low energies, the energy dispersion relation is linear, and this material can be described by massless Dirac equation contrasts with the semiconductors, for which the charge carriers are massive. In this framework, there is the problem of the electronic confinement in graphene because of tunneling. For overcome this difficulty, is proposed a new model of quantum ring, based on Dirac oscillator and models of rings Tan-Inkson and Bakke-Furtado. From this new coupling, are obtainable the energy spectrum, persistent currents and positive spinors to a graphene sheet with / without topological defect type disclination by massless Dirac equation (2+1).

Keywords: Graphene, Quantum Ring, Dirac Oscillator, Energy Spectrum, Persistent Currents, Topological Defect, Disclination.

Capítulo 1

Introdução

A evolução tecnológica que atualmente presenciamos é consequência, em parte, da diminuição da escala de atuação dos dispositivos eletrônicos: há um crescimento cada vez maior da quantidade de circuitos integrados sobre um único substrato semicondutor. Hoje, um dispositivo eletrônico simples é constituído por um substrato de material semicondutor fino, neste caso o silício (Si), envolvido por uma camada de óxido de Silício (SiO_2), que atua como isolante, e um eletrodo metálico. Obedecendo a tendência de mercado na relação custo-benefício entre quantidade de circuitos integrados e consumo de energia, os dispositivos eletrônicos passaram a diminuir a escala de sua atuação. Entretanto, na progressiva diminuição da escala, saindo da macroscópica, passando pela micrométrica até a nanométrica, surgiram problemas de ordem teórica no que diz respeito a natureza dos fenômenos: a abordagem física saía gradativamente do campo do eletromagnetismo clássico e adentrava no campo da mecânica quântica. Sendo a redução da escala necessária para a observação de fenômenos regidos pela mecânica quântica, a busca por novos materiais, que atendessem esta expectativa, foi responsável pelo surgimento da área de conhecimento denominada nanociência e sua aplicabilidade técnica, a nanotecnologia. Nesta busca por novas matérias, o grafeno ganhou seu papel de destaque.

Conhecido como uma forma alotrópica do carbono, o grafeno chamou atenção devido as suas propriedades físicas e sua condição de elemento raiz, a partir do qual, pode-se obter outras nanoestruturas como nanotubos e fullerêns[1]. Além disso o grafeno mostrou-se como um dos primeiros exemplares de estruturas cristalinas bidimensionais livres, que até o final da década de 90, supunha-se inexistentes pois, seriam termodinamicamente instáveis[2].

Neste material, os elétrons são os portadores de carga, que no limite contínuo para baixas energias, assemelham-se a férmions de Dirac, podendo ser portanto, descritos pela equação de Dirac. A partir dessa analogia, há a possibilidade de investigação de fenômenos físicos no grafeno como, por exemplo, o paradoxo de *Klein* [3, 4], que não é observável na física de altas energia e o efeito *Hall* quântico[5].

Diante do panorama exposto, o presente trabalho tem como objetivo o estudo do confinamento de um elétron numa monocamada de grafeno sujeita ao defeito topológico do tipo desclinação, na presença do fluxo *Aharonov-Bohm* perpendicular ao plano, num sistema físico conhecido como anel quântico. Para tanto, propomos um novo modelo de acoplamento para a equação de Dirac, baseado no acoplamento desenvolvido por K. Bakke e C. Furtado[6], para partículas relativísticas de spin 1/2, adaptado ao contexto do grafeno.

Este estudo se faz importante devido à sua contribuição teórica para o campo de conhecimento da matéria condensada, uma vez que ao se estudar os elétrons no grafeno, na presença de um potencial confinante externo, esses sofrem tunelamento quântico. Nosso modelo permite contornar esta dificuldade ao confinar o elétron numa estrutura anelar bidimensional (2-D), admitindo assim um melhor entendimento dos fenômenos de transporte próximos ao nível de Fermi. O entendimento dos fenômenos de transporte é peça fundamental para a fabricação de dispositivos eletrônicos.

No capítulo 2, exporemos a visão do grafeno como um cristal bidimensional (2-D), onde serão tratados as suas propriedades, sua configuração eletrônica, assim como a sua estrutura cristalina, suas estruturas de bandas e seu espectro de energia obtido através do modelo *tight-binding*. Será mostrado também que, no limite de baixas energias, a relação de dispersão de energia é linear, portanto, semelhante a dinâmica relativística de Férmions.

Revisaremos no capítulo 3, o confinamento em um anel quântico unidimensional (1-D), e neste contexto, discutiremos o *Efeito Aharonov-Bohm*[7] nesta estrutura, bem como os efeitos sobre o espectro de energia do elétron confinado e o surgimento das correntes persistentes decorrentes desse efeito. Ao final deste capítulo, será exposto o modelo de anel 2-D de Tan-Inkson[8], que se mostrou como uma boa generalização dos demais tipos de confinamento, como antipontos quânticos e pontos quânticos.

Abordaremos no capítulo 4, o modelo de confinamento para partículas relativísticas

de spin $1/2$ num modelo de anel 2-D, desenvolvido por K. Bakke e C. Furtado [6] baseados no acoplamento conhecido na literatura como Oscilador de Dirac. Neste capítulo, será obtido ainda o espectro de energia deste sistema, e também a investigação das correntes persistentes, onde mostramos que no limite não relativístico, ambos os resultados são compatíveis com modelo propostos por Tan-Inkson.

No capítulo 5, cerne deste trabalho, propomos um novo modelo de acoplamento anelar 2-D para estudar os efeitos do fluxo *Aharonov-Bohm*, assim como o surgimento de correntes persistentes no grafeno. Investigamos dois casos: no primeiro, para uma folha plana de grafeno submetida ao fluxo *Aharonov-Bohm*, foi obtido o espectro de energia e a corrente persistente; no segundo, foi feito o mesmo procedimento para uma folha de grafeno com defeito topológico do tipo desclinação, obtido através do processo de *Volterra*[9], onde obtivemos tanto o espectro de energia como a corrente persistente. Em ambos os casos, foram obtidos também os espinores de energia positiva, visto que os elétrons no grafeno estão na banda de condução, e cada espinor, neste contexto, corresponde a descrição de uma sub-rede sendo o grafeno entendido como a sobreposição de duas sub-redes cristalinas.

Por fim, no capítulo 6, concluimos apresentando uma discussão sobre os resultados obtidos e as perspectivas futuras.

Capítulo 2

O Grafeno Como Um Cristal Bidimensional

Neste capítulo será feito uma revisão sobre o grafeno, visto como um cristal bidimensional, destaca-se a sua constituição química bem como suas propriedades e configuração eletrônica. Neste caminho, na perspectiva da física do estado sólido, será discorrido a respeito da estrutura cristalina do grafeno, seu espectro de energia obtido via modelo *tight-binding* e estruturas de bandas. Com posse destes resultados, no limite de baixas energias, por fim, será mostrado como o grafeno pode ser descrito por uma teoria efetiva de dois espinores bidimensionais de Dirac.

2.1 Hibridização do Carbono e Alotropia

Na natureza entre todos os elementos químicos descobertos e catalogados, o carbono (C) certamente tem a sua parcela de notoriedade. O que corrobora este fato é a sua abundante presença na Terra que vai desde compostos inorgânicos como minerais, por exemplo, a compostos orgânicos presentes nos seres vivos. Estas variedades de substâncias são decorrentes da configuração eletrônica do carbono [10], a qual permite que o mesmo manifeste o processo de hibridização: Fenômeno pelo qual os orbitais atômicos incompletos, no caso os subníveis s e p , se combinam dando origem a novos orbitais com características mescladas de ambos, ou seja, orbitais híbridos. O átomo de carbono neutro possui número atômico 6, isto é, 6 prótons e 6 elétrons. Sendo assim sua configuração eletrônica mais estável é $1s^2 2s^2 2p^2$. A hibridização(hibridação) ocorre quando esta

configuração passa para a configuração $1s^2 2s^1 2p^3$, ou seja, quando o átomo é excitado.

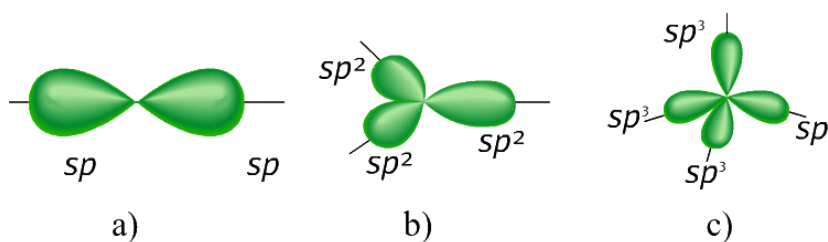


Figura 2.1: Tipos de hibridizações (hibridações)[11] que ocorrem no carbono : a) sp , b) sp^2 e c) sp^3 .

Podemos ver na figura (2.2) alguns exemplos de substâncias constituídas por carbono mediante o tipo de hibridização: O composto orgânico etino (C_2H_2) (i) e o inorgânico dióxido de carbono gás (CO_2) (ii) com hibridação sp ; O fulereno (C_{60}) (iii) e o grafeno (iv) com hibridização sp^2 ; finalmente o diamante (v) e o grafite (vi) para o caso sp^3 .

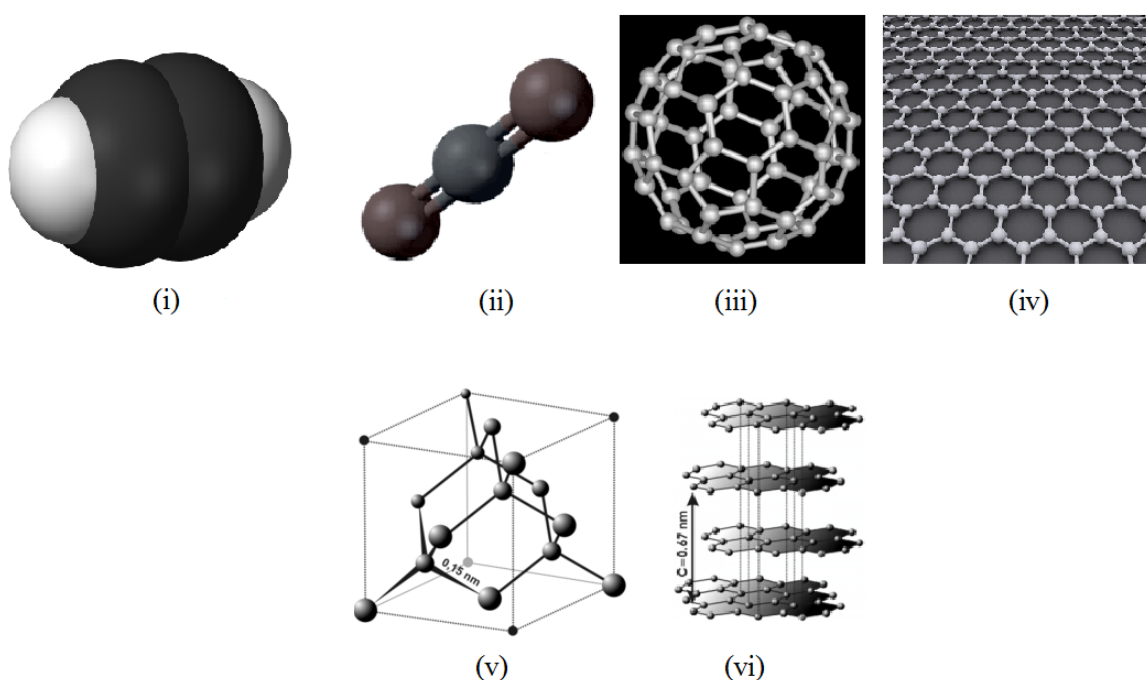


Figura 2.2: Exemplos de formas alotrópicas para as diferentes hibridizações do carbono [11].

A propriedade que um elemento químico possui de originar substâncias simples, com diferentes disposições (arranjos) em suas ligações, é denominada alotropia. Na figura

(2.2), com exceção das substâncias (i) e (ii), todas as demais são formas alotrópicas do carbono. Dentre estas, neste trabalho, vamos destacar o grafeno pelas suas peculiaridades que serão abordadas mais adiante.

2.2 Propriedades e Configuração Eletrônica do Grafeno

A grande relevância que o grafeno vem conquistando no meio científico é consequência direta, em grande parte, das descobertas de suas propriedades [12]:

- **Condutividade Elétrica:** Uma monocamada de grafeno apresenta uma condutividade elétrica da ordem de $0.96 \times 10^6 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ levemente maior que a do cobre, que é $0.6 \times 10^6 \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$ [13];
- **Resistência:** O grafeno possui uma resistência a ruptura de 42N/m enquanto que uma folha do melhor aço de mesma espessura ($3.35 \text{ \AA} = 3.35 \times 10^{-10} m$) possui uma resistência de 0.40 N/m. Logo o grafeno é 100 vezes mais forte do que o aço [14];
- **Condutividade Térmica:** A condutividade térmica do grafeno é regida por fônons e foi medida como sendo de aproximadamente $5000 W m^{-1} K^{-1}$. O cobre em temperatura ambiente possui condutibilidade térmica de $401 W m^{-1} K^{-1}$. Sendo assim, o grafeno conduz calor 10 vezes melhor do que o cobre [15];
- **Trasparência Óptica:** O grafeno é quase transparente, absorve apenas 2,3% da intensidade de luz, independentemente do comprimento de onda no domínio óptico. Este número é obtido através da constante de estrutura fina, α ¹. Assim o grafeno suspenso não apresenta qualquer cor[16].

Como já foi falado anteriormente, o grafeno possui uma hibridização do tipo sp^2 . Este tipo de hibridização é caracterizada pela mistura de um orbital 2s com dois orbitais 2p originando uma ligação π e, três ligações σ dispostas num arranjo geométrico trigonal plano: os orbitais híbridos tem máxima densidade de probabilidade para as três direções no plano xy com ângulo máximo de 120° . Nesse arranjo as ligações σ , as mais fortes, são responsáveis pela estabilidade da estrutura molecular enquanto a ligação π , a mais fraca onde se encontra o elétron de valência, é responsável pela condução [10].

¹O α neste caso se refere a magnitude da força eletromagnética. No capítulo 5, α está em outro contexto, como termo que identifica a presença do defeito.

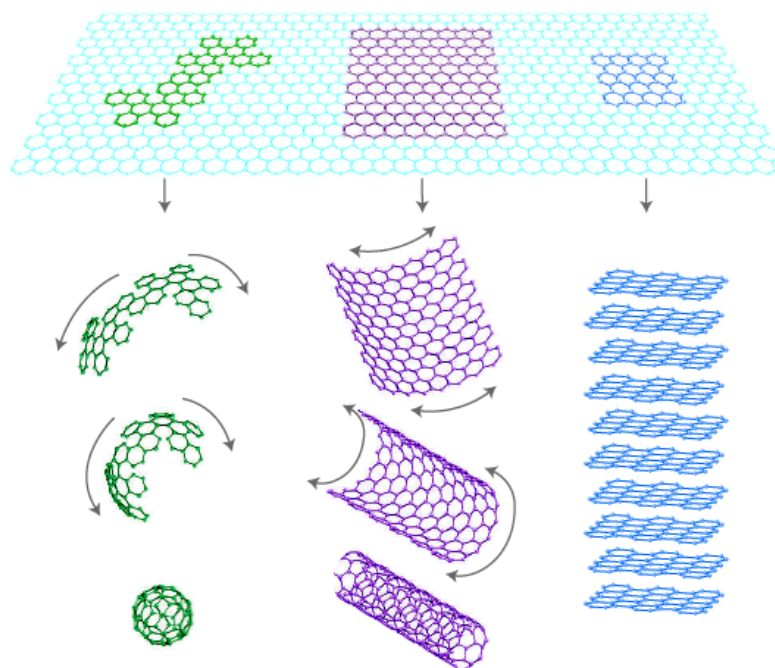


Figura 2.3: Monocamada de grafeno como matriz geradora de outras materias. Da esquerda para a direita: fulereno (0-D), nanotubo (1-D) e o grafite (3-D)[1].

O grafeno descrito como um cristal bidimensional consiste numa monocamada de átomos de carbono que formam uma rede hexagonal plana [1]. A partir desta película, dependendo da forma como é cortada a monocamada (ver figura 2.3), é possível obter outras três estruturas, sendo duas sintéticas e uma natural. Os materiais sintéticos são: o fulereno também conhecido como “buckyball”, que consiste numa película dobrada num arranjo zero-dimenisional; O nanotubo no qual a película é enrolada num arranjo unidimensional². No caso natural temos o grafite que é um mineral encontrado na natureza. Neste material, as monocamadas de grafeno estão empilhadas umas sobre as outras sendo que, o que as mantém unidas são as forças de Van der Waals. Devido estas forças formarem ligações fracas, torna-se fácil deformar o grafite pela ação de forças externas, fazendo com que as monocamadas se deslizem umas sobre as outras.

Historicamente a existência de materiais cristalinos bidimensionais era desacreditada devido às considerações teóricas de Landau e Peierls [1], os quais afirmavam que essa classe de material era termodinamicamente instável. Esta instabilidade seria consequên-

²Por conversão: O fulereno tem dimensão zero devido sua estrutura ser semelhante a um “ponto” enquanto que o nanotubo tem dimensão um por ser semelhante a um “fio oco”.

cia da contribuição divergente das flutuações térmicas, que nas redes cristalinas de baixa dimensão ocasionaria deslocamentos nos átomos da ordem da distância interatômica, para qualquer temperatura finita. Este mesmo argumento foi mantido e estendido por Mermin [2], e possui confirmação através de um ônus de observações experimentais que a testificam. A temperatura de fusão de uma película atômica é diretamente proporcional ao decréscimo de sua espessura: quanto menor a espessura menor a temperatura de fusão e, portanto, maior a sua instabilidade e dissociabilidade.

Assim monocamadas atômicas só eram conhecidas, até então, como partes constituintes de grandes estruturas atômicas tridimensionais [17], originadas pelo processo de Epitaxia³. Essa inexistência de cristais bidimensionais foi contestada em 2004, com a obtenção experimental do grafeno, pelo processo clivagem micromecânica [18]. Além deste, também foram obtidos outras formas cristalinas bidimensionais como, por exemplo, o nitreto de boro monocristalino [19]. Tanto o grafeno quanto o nitreto de boro estáveis em condições ambientes. Depois de obtida a película de grafeno, tornou-se possível observar alguns efeitos físicos interessantes, como o fato do grafeno se comportar como um semicondutor de *gap* nulo, que será mostrado mais a frente. Também foi observado que é relativamente simples controlar os portadores de carga a temperatura ambiente[20]. A partir destes estudos, abriu-se um leque de possíveis investigações como: pontos quânticos e tunelamento quântico [21], criação de transistores de grafeno [22, 23], eletrodos transparentes para telas de cristal líquido[24] entre outras.

2.3 Estrutura Cristalina do Grafeno

Nesta seção será analisado o arranjo geométrico do grafeno na rede direta e na rede recíproca, tendo em vista que é a partir desta última, que podemos construir a estrutura de bandas para esse material.

O grafeno, que possui uma rede cristalina hexagonal plana (*honeycomb* ou “*favo de mel*”) pode ser representado como a sobreposição de duas sub-redes trigonais (triangulares).

Partindo da figura (2.4), levando em conta a simetria translacional dos vetores da base $\mathbf{T}_1$ e $\mathbf{T}_2$, é possível construir duas redes de Bravais: uma sub-rede A, com o vetor

³Epitaxia é o método de deposição de uma película monocristalina sobre um substrato monocristalino. A película depositada é chamada de camada epitaxial.

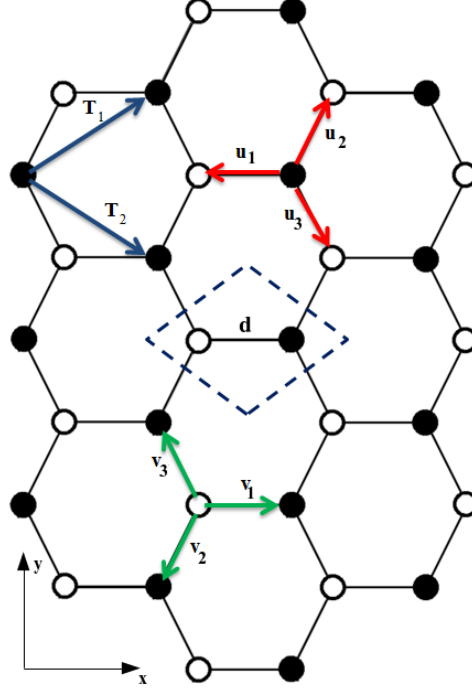


Figura 2.4: Célula unitária(losango tracejado),as duas sub-redes A (átomos brancos) e B (átomos pretos), os vetores da base no espaço direto $\mathbf{T}_1$ e $\mathbf{T}_2$ e vetores dos primeiros vizinhos $\mathbf{u}_{j=1,2,3}$ e $\mathbf{v}_{j=1,2,3}$.

gerador $\mathbf{r}_i = p_i \mathbf{T}_1 + q_i \mathbf{T}_2$ e uma sub-rede B com vetor gerador $\mathbf{r}_i = p_i \mathbf{T}_1 + q_i \mathbf{T}_2 + \mathbf{d}$, onde q_i e $p_i \in \mathbb{Z}$ e $\mathbf{d} = a_0(-1, 0)$ que é a origem na célula unitária com $a_0 = 1,42 \text{ \AA}$ (0,142nm) sendo o comprimento da ligação carbono-carbono. Nesta representação do grafeno, o sítio de uma sub-rede interage com três outros sítios vizinhos da outra sub-rede por meio dos vetores $\mathbf{u}_{j=1,2,3}$ (sub-rede B) e $\mathbf{v}_{j=1,2,3}$ (sub-rede A).

Considere uma folha de grafeno perfeita, ou seja, completamente plana e infinita, os vetores da base na rede direta são calculados, em coordenadas cartesianas como

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

A partir de (2.1), obtem-se o valor para o parâmetro de rede da folha de grafeno fazendo $|\mathbf{T}_1| = |\mathbf{T}_2| = 2,46 \text{ \AA}$ [25, 26]. Considerando a origem na célula unitária $\mathbf{d} = a_0(-1, 0)$ os vizinhos mais próximos são:

$$\mathbf{v}_1 = a_0(1, 0), \quad \mathbf{v}_2 = a_0 \left(\frac{-1}{2}, \frac{-\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{v}_3 = a_0 \left(\frac{-1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right);$$

$$\mathbf{u}_1 = a_0(-1, 0), \quad \mathbf{u}_2 = a_0\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{u}_3 = a_0\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right). \quad (2.2)$$

Para calcular os vetores que geram a rede recíproca vamos definir $\mathbf{K}_1 = (m_1, n_1)$ e $\mathbf{K}_2 = (m_2, n_2)$ e impor a seguinte condição:

$$\mathbf{K}_i \mathbf{T}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad ,$$

$$\text{onde } \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}. \quad (2.3)$$

Dos vetores (2.1) e da condição (2.3) teremos dois sistemas lineares com duas equações e duas incógnitas. Resolvendo estes sistemas, são obtidos os geradores da rede recíproca:

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{a_0} \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi\sqrt{3}}{3} \right) \quad \text{e} \quad \mathbf{K}_2 = \frac{1}{a_0} \left(\frac{2\pi}{3}, -\frac{2\pi\sqrt{3}}{3} \right). \quad (2.4)$$

De maneira análoga ao caso do espaço real o parâmetro de rede da folha de grafeno no espaço recíproco é $|\mathbf{K}_1| = |\mathbf{K}_2| = 4\pi/3a$. A primeira Zona de Brillouin (ZB) está representada na figura (2.5) e contém vários pontos relacionados com certas simetrias intrínsecas do sistema. Os pontos K e K' são chamado de “*pontos de Dirac*”.

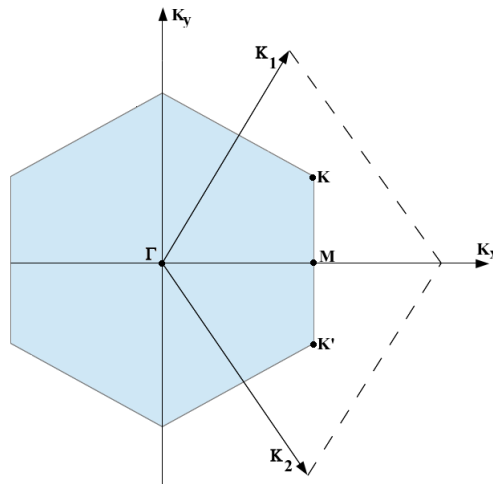


Figura 2.5: Espaço recíproco com a primeira Zona de Brillouin destacando os pontos de alta simetria Γ , K, K', e M.

Os pontos K e K' representam pontos não equivalente da ZB e estão associados ao comportamento do elétron no grafeno, como será exposto mais a frente.

Pontos	Γ	K	M
Coordenadas	$(0,0)$	$(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0})$	$(\frac{2\pi}{3a_0}, 0)$

Figura 2.6: Coordenadas Cartesianas dos pontos especiais Γ , K e M da primeira Zona de Brillouin do Grafeno

Conhecer estes pontos é particularmente importante pois as curvas de dispersão de energia(estrutura de bandas) para o grafeno são obtidas variando $\mathbf{k}$, definido adiante, nessas três direções.

2.4 Espectro de Energia e Estrutura de Bandas do Grafeno

Uma melhor interpretação a respeito do comportamento dos elétrons no grafeno é obtida mediante o cálculo do espectro de energia pois, através dele, é possível construir a estrutura de bandas: esta permite dar forma a relação energia-momento para os elétrons numa rede cristalina. Quando se está investigando uma rede cristalina o que é visto, na verdade, é um amontoado de átomos distribuídos em intervalos regulares, constituindo um sistema com potencial periódico. Para este tipo de potencial, existem vários métodos de calcular o espectro de energia, contudo escolheremos a aproximação *tight-binding*.

No modelo *tight-binding*, o potencial da rede cristalina é forte de modo que o autoestado de um elétron que passeia pela mesma é expresso pelo orbital ao qual se prende, localizado sobre o sítio atômico. Os elétrons mais próximos dos seus respectivos núcleos atômicos estão fortemente ligados aos mesmos, e são descritos pelos próprios orbitais atômicos, com níveis de energia discretos. Como na rede cristalina os átomos estão dispostos num arranjo geométrico bem definido(localizados),tem-se uma superposição dos orbitais comuns dos elétrons. Essa superposição é responsável pelo alargamento dos níveis de energia, que se apresentam como contínuos, originando, dessa forma, as bandas de energia do diagrama de dispersão. Outra justificativa para o uso desse método é que ele

permite expressões analíticas aproximadas para os autovalores do operador hamiltoniano que será do nosso interesse.

O Teorema de Bloch nos diz que as autofunções de um sistema qualquer podem ser expressas como combinações lineares de orbitais atômicos, desde que satisfaçam a condição:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (2.5)$$

Para o grafeno vamos supor uma função de onda Ψ como combinação linear dos orbitais atômicos Φ que representam cada sub-rede e satisfaçam a condição (2.5) sobre simetria de translação:

$$\Psi(\mathbf{r}) = C_A\Phi_A(\mathbf{r}) + C_B\Phi_B(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Nesta equação $\Phi_A(\mathbf{r})$ e $\Phi_B(\mathbf{r})$ são as funções de onda dos átomos A e B da célula primitiva, $\mathbf{k}$ é o vetor de onda que localiza o ponto de interesse no espaço recíproco e $\mathbf{r}$ é o vetor localizado no espaço real. C_A e C_B são coeficiente que dependem de $\mathbf{k}$ mas não de $\mathbf{r}$. Os orbitais atômicos são definidos como:

$$\Phi_A(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i); \quad (2.7)$$

$$\Phi_B(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j); \quad (2.8)$$

De tal forma que :

$$\begin{aligned} \Phi_A(\mathbf{r} + \mathbf{r}_1) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_1); \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_i)); \\ &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1)} \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_i)); \\ &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_m} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \phi(\mathbf{r}); \end{aligned}$$

satisfazem o Teorema de Bloch (2.5). As somas são sobre N células unitárias da rede, sendo os átomos A e B, de cada célula unitária, localizados pelos respectivos vetores $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{r}_j$. Observe que as equações (2.7) e (2.8) são representadas como uma série de Fourier onde as funções ϕ são chamadas funções de Wannier. Estas funções são ortonormais e altamente localizadas, de maneira que decaiam à zero quando separadas do ponto central $\mathbf{r}$:

$$\int \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^2r = \delta_{ji}. \quad (2.9)$$

Assim para obter as autoenergias do sistema é preciso calcular:

$$E_k = \frac{\int \Psi^*(\mathbf{r}) \mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}) d^2r}{\int \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^2r} = \frac{\sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \int \phi(\mathbf{r}) \mathcal{H} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^2r}{\sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \int \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^2r}, \quad (2.10)$$

onde $E_k \geq E_{ef}$ e E_{ef} corresponde a energia do estado fundamental, a partir do qual, pode-se obter os valores aproximados dos elementos da matriz hamiltoniana⁴[27, 28]. Contudo uma maneira mais simples de abordar o problema é calculando o hamiltoniano tight-binding como[29]:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad (2.11)$$

onde a soma é através dos pares de átomos vizinhos mais próximos i, j sobre a rede e $a_i^\dagger, a_j$ são operadores anticomutativos:

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad \{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij}. \quad (2.12)$$

O termo t chama-se “hopping”, ou transferência, que é a probabilidade de transição mediante a transferência de energia dos elétrons na rede. Os índices i e j são os sítios da rede onde estão ocorrendo a transferência. Os operadores $a_i^\dagger$ e $a_j^\dagger$ são responsáveis pela criação de um elétron nas sub-redes A e B respectivamente, analogamente os operadores de aniquilação a_i e a_j aniquilam um elétron nas sub-redes A e B. Define-se o autoestado do sistema como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{iA} C_A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle + \sum_{iB} C_B e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} a_i^\dagger |O\rangle, \quad (2.13)$$

⁴Essência do Método Variacional.

com o seu complexo conjugado:

$$\langle \Psi | = \sum_{jA} C_A e^{-i\mathbf{kr}_j} \langle O | a_j + \sum_{jB} C_B e^{-i\mathbf{kr}_j} \langle O | a_j, \quad (2.14)$$

no qual $|O\rangle$ representa o estado fundamental. Vamos fixar um ponto na rede, no caso os átomos A onde $\mathbf{r}_j = \mathbf{v}_j + \mathbf{r}_i$. Aplicando o hamiltoniano (2.11) em (2.13) e usando as propriedades dos operadores (2.12) temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} | \Psi \rangle &= -t \sum_{iA} \sum_{ij} e^{i\mathbf{kr}_i} C_A (a_i^\dagger a_j a_i^\dagger) | O \rangle - t \sum_{iB} \sum_{ij} e^{i\mathbf{kr}_i} C_B (a_i^\dagger a_j a_i^\dagger) | O \rangle; \\ &= -t \sum_{iA} \sum_{ij} e^{i\mathbf{kr}_j} C_A a_i^\dagger | O \rangle - t \sum_{iB} \sum_{ij} e^{i\mathbf{kr}_j} C_B a_i^\dagger | O \rangle; \\ &= -t \sum_j e^{i\mathbf{ku}_j} \sum_{iA} C_A e^{i\mathbf{kr}_i} a_i^\dagger | O \rangle - t \sum_j e^{i\mathbf{kv}_j} \sum_{iB} C_B e^{i\mathbf{kr}_i} a_i^\dagger | O \rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Na busca dos níveis de energia, vamos fazer a diagonalização $E_k = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$ de modo que, o autoestado (2.13) seja normalizável quando $|C_A|^2 + |C_B|^2 = 1$. Neste caminho obtemos:

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_j e^{i\mathbf{ku}_j} \\ -t \sum_j e^{i\mathbf{kv}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_B \\ C_A \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} C_B \\ C_A \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

em que $\begin{pmatrix} C_B \\ C_A \end{pmatrix}$ são os componentes do autovetor. Os autovalores são adquiridos pelo cálculo do determinante:

$$\det \begin{vmatrix} 0 - E_k & -t \sum_j e^{i\mathbf{ku}_j} \\ -t \sum_j e^{i\mathbf{kv}_j} & 0 - E_k \end{vmatrix} = 0.$$

Assim sendo, os autovalores de energia são:

$$E_k^2 = t^2 \sum_j e^{i\mathbf{ku}_j} \sum_j e^{i\mathbf{kv}_j}. \quad (2.17)$$

Pela simetria do sistema $\mathbf{u}_j = -\mathbf{v}_j$ com $j = 1, 2, 3$. Reescrevendo (2.16):

$$E_k^2 = t^2 (e^{i\mathbf{ku}_1} + e^{i\mathbf{ku}_2} + e^{i\mathbf{ku}_3}) (e^{i\mathbf{kv}_1} + e^{i\mathbf{kv}_2} + e^{i\mathbf{kv}_3}); \quad (2.18)$$

$$= t^2 (e^{-i\mathbf{kv}_1} + e^{-i\mathbf{kv}_2} + e^{-i\mathbf{kv}_3}) (e^{i\mathbf{kv}_1} + e^{i\mathbf{kv}_2} + e^{i\mathbf{kv}_3}). \quad (2.19)$$

Com os vetores (2.2) substituídos em (2.19), e usando as identidades trigonométricas: $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos\theta$ e $\cos^2\theta = \frac{1}{2} + \frac{\cos 2\theta}{2}$, chegamos na equação de dispersão do grafeno:

$$E_k = \pm t \sqrt{1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right)\cos\left(\frac{3k_x a_0}{2}\right)}. \quad (2.20)$$

Na equação (2.20) o espectro de energia de uma partícula é entendido como duas superfícies $E_k > 0$ e $E_k < 0$. O primeiro caso corresponde a banda de condução enquanto o segundo caso a banda de valência. As bandas se tocam nos seis pontos que correspondem aos vértices do hexágono da primeira zona de Brillouin (ver figura 2.6). Os estados $E_k < 0$ estão preenchidos, enquanto os estados $E_k > 0$ estão vazios, de modo que a estrutura de bandas de energia é semipreenchida, sendo que o nível de Fermi está localizado nos seis pontos, $\mathbf{K}_{\pm} = (0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0})$ e $\mathbf{K}_{\pm} = (\pm \frac{2\pi}{3a_0}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0})$ onde $E_k = 0$. Na figura (2.6) temos a representação das duas bandas[30], bem como os pontos de alta simetria e os cones de Dirac, traçadas para valores finitos de $t = 2.7\text{eV}$ e $t' = -0.2t$:

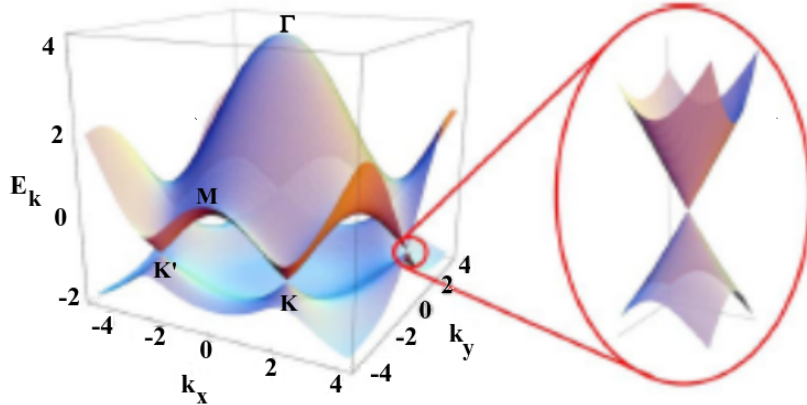


Figura 2.7: Estrutura de bandas do grafeno com os ponto de alta simetria Γ , M , K e K' . Ampliado em destaque um ponto de Dirac. [30]

2.5 Férmions Livres Sem Massa

Para uma melhor compreensão do comportamento do grafeno próximo aos pontos de Fermi, vamos escolher um dos pontos de Fermi não equivalentes $\mathbf{K}_+ = (\frac{2\pi}{3a_0}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0})$, por exemplo $\mathbf{K}_+ = (\frac{2\pi}{3a_0}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0})$ e substituir as componentes do vetor $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ por $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{p}$, com $|\mathbf{p}| \ll |\mathbf{K}_{\pm}|$, na equação (2.20) e posteriormente faremos a expansão

pra pequenos momentos $|\mathbf{p}|$. Usando as expansões em Taylor $\left(\cos\theta = 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots\right)$ e $\left(\sin\theta = \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots\right)$ em termos de segunda ordem, chega-se na expressão [30]:

$$E_k = \pm a_0 t \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \pm \frac{3}{2} a_0 t |\mathbf{p}| = \pm |\mathbf{p}| v_F, \quad (2.21)$$

que é a equação de dispersão de energia para o grafeno, onde v_F é a velocidade de Fermi⁵ com valor $v_F \approx \frac{3a_0 t}{2} \approx 10^6 m/s$. Medidas experimentais indicam que esta aproximação é válida para valores de energia da ordem de 0,6 eV [31]. A equação (2.21) é linear, e é semelhante à relação de dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ para $m_0 = 0$, sendo que a velocidade de Fermi v_F faz o papel da velocidade da luz c . Em termos do hamiltoniano, que é a matriz 2x2 no interior equação (2.16), se fizermos a expansão em potências de $|\mathbf{p}|$, e consideramos até a primeira ordem, temos:

$$H_{\pm} = \frac{3ta_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

os sinais $\pm$ são relacionados a qual dos pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$, a expansão é feita. Em termos de uma descrição efetiva, que inclua em um mesmo hamiltoniano a contribuição dos dois pontos de Dirac para a dinâmica dos portadores de carga [32], a equação (2.22) pode ser reescrita como uma matriz no espaço 4x4 ($\mathbf{K}_A, \mathbf{K}_B, \mathbf{K}'_A, \mathbf{K}'_B$):

$$H_{\pm} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_x + ip_y \\ 0 & 0 & p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

que para o problema de autovalores $H_{\pm}\Psi = E\Psi$ implica que a função de onda deve ter quatro componentes

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \\ \Psi'_A \\ \Psi'_B \end{pmatrix}.$$

Na mecânica quântica relativística, Wolfgang Ernst Pauli, introduziu um conjunto de matrizes para descrever a dinâmica de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, ou seja, um férmion. Estas matrizes são definidas como:

⁵É a velocidade que corresponde a uma energia cinética igual a energia de Fermi.

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

que satisfazem as relações:

$$\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta_{ij}I, \quad \sigma^i \sigma^j = i\sigma^k, \quad (\sigma^i)^2 = I, \quad (2.25)$$

onde I é a matriz identidade, no caso 2x2, e os índices i, j, k são 1,2,3 respectivamente.

Na equação (2.23), $H_+ \equiv H_{\mathbf{K}}$ corresponde ao ponto de Fermi $\mathbf{K}_+ \equiv \mathbf{K}$ analogamente $H_- \equiv H_{\mathbf{K}'}$ se refere a $\mathbf{K}_- \equiv \mathbf{K}'$. Usando as matrizes (2.24) nesta equação, chegamos na seguinte descrição:

$$H_{\pm} \equiv H_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} H_{\mathbf{K}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & H_{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} = v_F \begin{pmatrix} \sigma_{\mathbf{p}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\sigma_{\mathbf{p}})^* \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

tal que $\mathbf{0}$ é a matriz nula 4x4. Nesta equação cada hamiltoniano obtido via limite contínuo,

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}} = \sigma_{\mathbf{p}} v_F = \hbar v_F \sigma_{\mathbf{k}} \quad e \quad \mathcal{H}_{\mathbf{K}'} = (\sigma_{\mathbf{p}})^* v_F = \hbar v_F (\sigma_{\mathbf{k}})^*, \quad (2.27)$$

associado aos respectivos pontos de Fermi, atuam como operadores de Dirac em duas dimensões, com $\mathbf{k}$ sendo o vetor de onda.

Assim, podemos concluir que as excitações de baixa energia (pequenos momentos) da rede, para a estrutura de banda semipreenchida, são descritas por uma teoria eficaz de dois espinores bidimensionais de Dirac, sendo que cada componente destes espinores corresponde também a uma das sub-redes, A ou B.

Capítulo 3

Confinamento em Anéis Quânticos

Neste capítulo será revisado o confinamento do elétron em um anel unidimensional (*quantum rings*). Na literatura, o modelo de confinamento tem aplicações experimentais e teóricas. Dentre estas aplicações será destacado o efeito *Aharonov-Bohm*, o qual demonstra que o potencial vetor, conhecido no eletromagnetismo clássico, tem uma influência física sobre a função de onda do anel 1-D. Neste contexto, também será revisado o conceito de correntes persistentes, que é um fenômeno consequente do efeito *Aharonov-Bohm*. Por fim será exposto o modelo de confinamento para um elétron em um anel bidimensional, o modelo desenvolvido por Tan-Inkson, que se mostrou como uma generalização dos demais tipos de confinamento, como pontos quânticos e antipontos quânticos, anel 1-D e o fio esticado infinito 2-D. Deste modelo, é possível obter tanto o espectro como as autofunções de energia de maneira analítica, para um anel 2-D na presença de um campo magnético, mostrando-se, assim, uma ferramenta ideal e eficaz para a investigação do efeito *Aharonov-Bohm* e das correntes persistentes em anéis quânticos. Será comparado também os dois modelos abordados neste capítulo, mostrando as diferenças que existem entre ambos.

3.1 Confinamento do Elétron no Anel Unidimensional(1-D)

O problema do confinamento de um elétron em um anel unidimensional é bastante conhecido na literatura. Neste problema, a região do espaço, na qual o elétron se comporta livremente, é uma circunferência de comprimento $C = 2\pi r_0$. Nesta configuração, o elétron

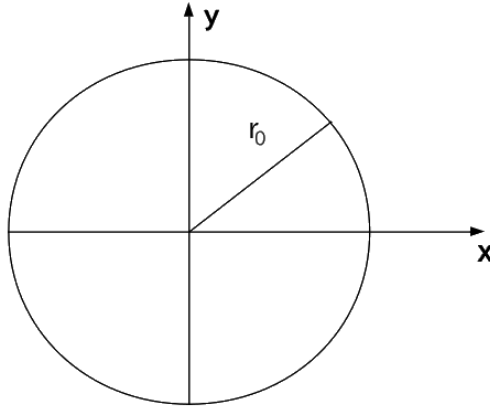


Figura 3.1: Circunferência de raio r_0 no plano x-y onde o elétron está confinado.

apresenta comprimento de onda associado e momento angular respectivamente como:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad J = pr_0 = mvr_0, \quad (3.1)$$

onde a primeira equação em (3.1) é a relação de de Broglie. A energia cinética para esta configuração é definida como:

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{J^2}{2mr_0^2}, \quad (3.2)$$

resultado obtido a partir das equações (3.1). Contudo, a energia total do sistema é definida como $E = T + V$. Assumindo que a partícula não experimenta energia potencial, $V = 0$, a energia total é simplesmente a equação (3.2). Todavia, devido a relação de de Broglie, nem todos os valores do momento vão contribuir de forma construtiva para o comprimento da circunferência, apenas os valores inteiros :

$$\lambda = \frac{2\pi r_0}{n}, \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.3)$$

Assim de (3.3) e (3.2) temos a energia total:

$$E = \frac{J^2}{2mr_0^2} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mr_0^2}, \quad \text{onde } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

Os valores $J = \pm \hbar n$ indicam se a partícula está no sentido horário ou anti-horário. Assim, o momento angular, com rotação no eixo $\hat{z}$, pode ser descrito como $J_z = m_l \hbar$, onde $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ é o momento angular do elétron. Com posse de todas essas considerações, é possível obter os autovalores de energia:

$$E_{m_l} = \frac{\hbar^2 m_l^2}{2mr_0^2}, \quad (3.5)$$

onde a energia independe da direção da rotação. O hamiltoniano deste elétron estritamente confinado no anel unidimensional[33], depende apenas da componente polar φ ¹

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3.6)$$

pois o raio r_0 é constante. Obviamente a função de onda Ψ é função de φ . A solução trivial pra esse problema é:

$$\Psi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi} \quad (3.7)$$

onde a condição de contorno pra essa configuração é $\Psi_m(\varphi + 2\pi) = \Psi_m(\varphi)$.

Este é o modelo de anel 1-D que, apesar de sua simplicidade, tem uma grande variedade de aplicações teóricas, como o estudo do espectro de absorção óptica de sistemas eletrônicos 0-dimensional[34], e experimentais que estudam efeitos puramente quânticos como o efeito Hall quântico, efeito Aharonov-Bohm e correntes persistentes. A respeito deste dois últimos tópicos, vamos explorar mais nas próximas seções.

3.2 Efeito Aharonov - Bohm

No ano de 1959, Aharonov e Bohm publicaram um artigo [7] que possibilitou, do ponto de vista físico, uma interpretação para o potencial vetor, até então visto como mero artifício matemático no eletromagnetismo, utilizado para a obtenção de campos elétricos e magnéticos. O *efeito Aharonov-Bohm*, como ficou conhecido na literatura, determina que uma partícula carregada adquiere uma fase em sua função de onda ao circular um solenóide infinito. Neste fenômeno, no espectro de energia das partículas carregadas surge uma dependência do fluxo magnético, fato não previsto pela teoria clássica. Como veremos mais a frente, o responsável por isso é o potencial vetor.

Para um melhor entendimento, vamos ilustrar esse efeito com o arranjo experimental mais usual, dentre os vários que existem, onde tal efeito pode ser observado. A idéia principal deste experimento é a verificação do padrão de interferência de dois feixes de elétrons que viajam de um ponto a outro, por caminhos diferentes, nas vizinhanças de um solenóide infinito e impenetrável, como mostra a figura (3.2). Nesta figura os feixes

¹Podemos ver o anel 1-D como uma seção transversal do cilindro infinito, de modo que $\rho = r_0 = \text{const.}$ e $z = \text{const.}$, sendo o gradiente em coordenadas cilíndricas definido como $\nabla = \frac{1}{r_0} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{e}_\varphi$. No caso o operador quântico $H \equiv \hat{H}$, tal que, $H = \frac{1}{2m} p_\varphi^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2$.

de elétrons percorrem duas regiões distintas externas ao solenóide, com campo magnético nulo, até se encontrarem novamente numa região de interferência. Pensando de maneira

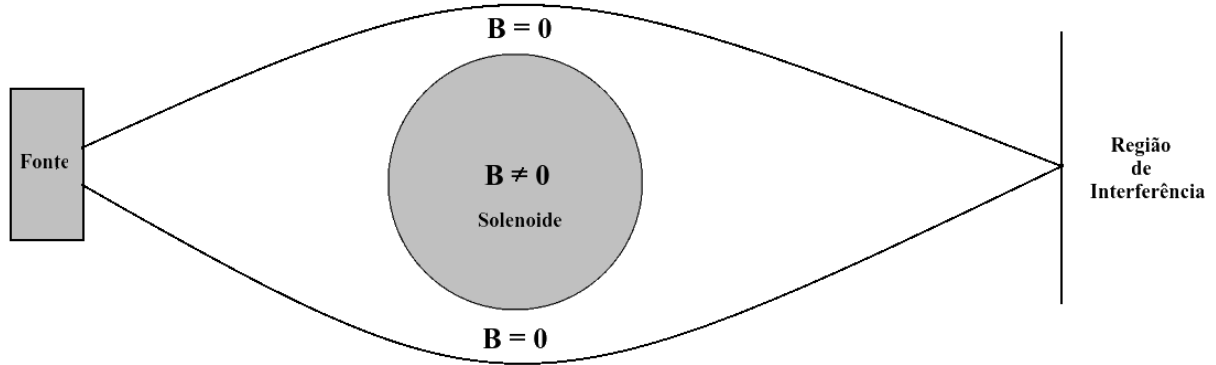


Figura 3.2: Esquema do arranjo experimental.

clássica, neste arranjo não haveria nenhuma interferência nos feixes, de modo que, se não há diferença de fase entre eles na fonte, também não há diferença de fase na região de interferência. Contudo a Mecânica Quântica nos diz que esta premissa é falsa, pois, foi observado que na região de interferência, os feixes apresentam uma diferença de fase proporcional ao fluxo magnético dentro do solenóide como veremos.

O experimento que verificou a existência de tal efeito foi realizado pela primeira vez em 1960 por Chambers[35], contudo restaram ainda várias dúvidas no que diz respeito à natureza da fase, que surgia na região de interferência. Isso ocorria por causa da dificuldade de construir um aparato experimental, que simulasse um solenóide infinito: Uma possível explicação, seria que a defasagem no espectro era consequência da interação dos elétrons com o campo magnético proveniente de algum “vazamento de fluxo”, pelas bordas do solenóide, sendo portanto um fenômeno regido pelas leis clássicas. Uma maneira de resolver estas dúvidas, por exemplo, foi proposta em 1986, com o experimento realizado por Tonomoura[36], que ao invés de trabalhar com o solenóide no arranjo experimental acima, trabalhou com um toróide. Esta modificação corrigiu o possível “vazamento” de fluxo, pois o toróide confina o campo magnético, evitando o efeito de borda. O toróide em questão tem a sua superfície toda coberta por um material supercondutor, de maneira a impedir qualquer passagem de campo magnético para região exterior devido ao efeito *Meissner*².

²O efeito Meissner é a expulsão de um campo magnético de um supercondutor.

3.3 O Potencial Vetor do Anel 1-D

De acordo com a figura (3.2), considere um campo magnético na direção $\hat{z}$ de modo que:

$$\mathbf{B} = \begin{cases} B\hat{e}_z, & r < r_a \\ 0, & r \geq r_a \end{cases}, \quad (3.8)$$

onde r_a é o raio interno do solenóide e r é o raio do circuito amperiano. Por definição o campo magnético vem da equação:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (3.9)$$

com $\mathbf{A}$ sendo o potencial vetor. Considerando o campo magnético interno ao solenóide uniforme, podemos calcular o fluxo da seguinte maneira:

$$\int_S \mathbf{B} \, d\mathbf{a} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \, d\mathbf{a}. \quad (3.10)$$

Utilizando o teorema de Stokes, temos que:

$$\int_S \mathbf{B} \, d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{A} \, d\mathbf{l} \quad (3.11)$$

com C sendo o contorno da superfície S . Podemos reescrever (3.11) ainda como:

$$\Phi = \oint_C \mathbf{A} \, d\mathbf{l}, \quad (3.12)$$

onde $\Phi = Ba$ é o fluxo magnético que passa pelo anel e $a = \pi r_a^2$ a área restrita pelo anel. Assim temos duas possibilidades para calcular o valor de $\mathbf{A}$ na equação (3.12): Uma é para o circuito amperiano C_1 com $r > r_a$; outra possibilidade é C_2 com $r < r_a$, como mostra a figura(3.3).

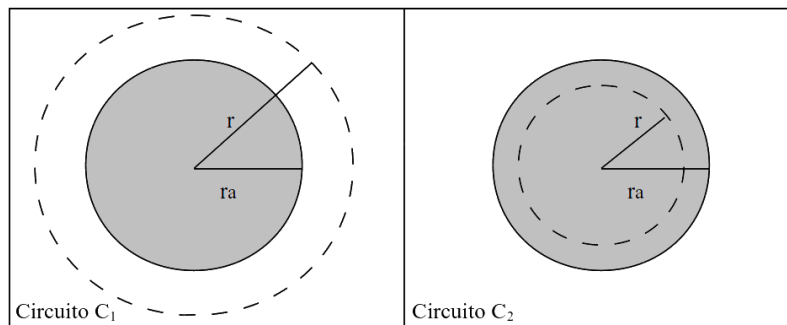


Figura 3.3: Circuitos amperianos C_1 , com $r > r_a$, e C_2 com $r < r_a$.

Para os dois tipos de circuitos amperianos, assumindo a simetria cilíndrica do solenóide, o potencial vetor é calculado como:

$$\mathbf{A} = \begin{cases} \frac{rB}{2}\hat{e}_\varphi, & r \leq r_a \\ \frac{r_a^2 B}{2r}\hat{e}_\varphi, & r \geq r_a \end{cases}. \quad (3.13)$$

No caso particular do anel, $r = r_a$, onde os elétrons se encontram confinados, o potencial vetor assume o valor:

$$\mathbf{A} = \frac{r_a B}{2}\hat{e}_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi r_a}\hat{e}_\varphi, \quad (3.14)$$

onde $\Phi = Ba = B(\pi r_a^2)$. Observamos, então, que o potencial magnético $\mathbf{A}$ não é nulo nas regiões onde não há campo magnético. Com a posse do resultado (3.14) podemos ver o que acontece na função de onda na presença deste potencial vetor.

Em Mecânica Quântica, o hamiltoniano que descreve a dinâmica de um elétron, com carga elementar (e), na presença de um potencial vetor é definido como:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2. \quad (3.15)$$

No caso do anel 1D, $r = r_a = r_0$, o potencial vetor é o que foi obtido na equação (3.14). O fluxo magnético Φ , e por consequência o potencial vetor $\mathbf{A}$, podem modificar as autofunções e as autoenergias, isso é verificado resolvendo a equação de Schrödinger estacionária $H\Psi = E\Psi$. Como para o anel 1-D, o momento só depende de φ , podemos reescrever o hamiltoniano (3.15) como [37, 38]:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(-\frac{i\hbar}{r_0} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e\Phi}{2\pi c r_0} \right)^2, \quad (3.16)$$

fazendo $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ podemos reescrever ainda como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2. \quad (3.17)$$

A grandeza Φ_0 na equação acima é conhecida como “quantum de fluxo magnético”. Podemos considerar que a solução para esse problema pode ser a mesma solução trivial (3.7) independe do fluxo magnético, mas no caso das autoenergias associadas aos elétrons, vai aparecer uma dependência de maneira que:

$$E(m_l, \Phi) = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \left(m_l - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2. \quad (3.18)$$

Como havíamos comentado anteriormente, no espectro de energia aparece uma dependência proporcional ao fluxo magnético, e portanto, associada ao potencial vetor.

3.4 A Fase na Função de Onda

Para obtermos a fase na função de onda, vamos fazer uma transformação de *gauge* para $\mathbf{A}$, que satisfaça $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ com $\mathbf{B} = 0$. Escolhendo:

$$\mathbf{A} = \nabla \Lambda , \quad (3.19)$$

onde Λ é uma função escalar. Pelo valor de $\mathbf{A}$ dado na equação (3.14) e sabendo que o gradiente em coordenadas cilíndricas de Λ é escrito como

$$\nabla \Lambda = \frac{\partial \Lambda}{\partial r_0} \hat{e}_{r_0} + \frac{1}{r_0} \frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi} \hat{e}_\varphi + \frac{\partial \Lambda}{\partial z} \hat{e}_z , \quad (3.20)$$

obteremos o valor de Λ como:

$$\Lambda(\varphi) = \frac{\Phi \varphi}{2\pi} . \quad (3.21)$$

Agora definindo o operador de transformação unitária relacionada ao *gauge* que obtemos em (3.21) como:

$$\begin{aligned} U &= e^{-\frac{ie}{\hbar c} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}} , \\ &= e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Delta \Lambda(\varphi)} , \\ &= e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Phi} , \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde foram utilizados o teorema do gradiente $\oint_C (\nabla \Lambda) \cdot d\mathbf{l} = \Lambda(b) - \Lambda(a) = \Delta \Lambda$ e o teorema de Stokes $\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s}$ para o contorno $C = 2\pi r_0$ e a superfície $S = \pi r_0^2$, respectivamente. Este operador é responsável pelas transformações³:

$$\begin{cases} \Psi \rightarrow \Psi' = U\Psi \\ H \rightarrow H' = U H U^{-1} \end{cases} , \quad (3.23)$$

onde H é hermitiano⁴ e U^{-1} é o operador inverso. Além disso o operador U satisfaz as propriedades:

$$U^\dagger U = U U^\dagger = 1 \quad e \quad U^\dagger = U^{-1}. \quad (3.24)$$

A leitura das transformações em (3.23) nos diz que a principal consequência é a conservação do espectro de energia pois, se $H\Psi = E\Psi$, então $H'\Psi' = U H U^{-1} U\Psi =$

³Também conhecidas por transformações de similaridade que mantém o traço da matriz hamiltoniana inalterado, que vem a ser os autovalores da mesma.

⁴Satisfaz a relação $H = H^\dagger$.

$UH\Psi = E\Psi'$. O operador unitário U na verdade é responsável por uma transformação de *gauge*, de modo que podemos sair de uma representação, no caso H' , Ψ' para outra representação H , Ψ ou

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)\Psi' = E\Psi' \rightarrow \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi r_0}\right)\Psi = E\Psi, \quad (3.25)$$

onde claramente vemos a conservação da energia. Esta conservação é devido a invariância de *gauge*: propriedade responsável por garantir que as quantidades físicas mensuráveis sejam também invariantes. Nesta mudança de representação (3.25), a transformação de *gauge* correspondente é traduzida como

$$\begin{cases} \tilde{\mathbf{A}} = 0 \rightarrow \mathbf{A} = \tilde{\mathbf{A}} + \nabla\Lambda = \nabla\Lambda \\ \tilde{V} = 0 \rightarrow V = \tilde{V} - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} = 0 \end{cases}, \quad (3.26)$$

também conhecida como *gauge de Lorentz*. Tomando a transformação $\Psi' = U\Psi$ em (3.23) e lembrando que $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ temos

$$\Psi' = e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Phi}\Psi = e^{-2\pi i\frac{\Phi}{\Phi_0}}\Psi. \quad (3.27)$$

O termo $e^{-2\pi i\frac{\Phi}{\Phi_0}}$ é a fase da função de onda que aparece nas regiões de campo magnético nulo, também conhecido como a *fase Aharonov-Bohm*. Assim a função de onda adquire uma fase quando se move ao longo de um caminho por onde passa o fluxo magnético. Para o anel 1-D, a *fase Aharonov-Bohm* vai alterar as condições de contorno [33]: enquanto a função de onda original satisfaz condições de contorno periódicas, $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$, para a nova função de onda temos a condição de contorno modificada⁵ $\Psi'(\varphi + 2\pi) = \Psi'(\varphi)e^{-2\pi i\frac{\Phi}{\Phi_0}}$. Outra coisa interessante é que esta nova condição de contorno conduz de maneira natural a autovalores periódicos, $E(m_l) = E(m_l + \frac{\Phi}{\Phi_0})$, análogo as condições de Bloch para estados eletrônicos de uma rede periódica, que levam à periodicidade das autoenergias na rede recíproca. Observe que o espectro (3.18) é periódico no fluxo Φ com período de um quantum de fluxo magnético Φ_0 , que é ilustrado pela figura (3.6).

⁵Conhecida na literatura como “retorcida”(*Twisted Boundary Condition*).

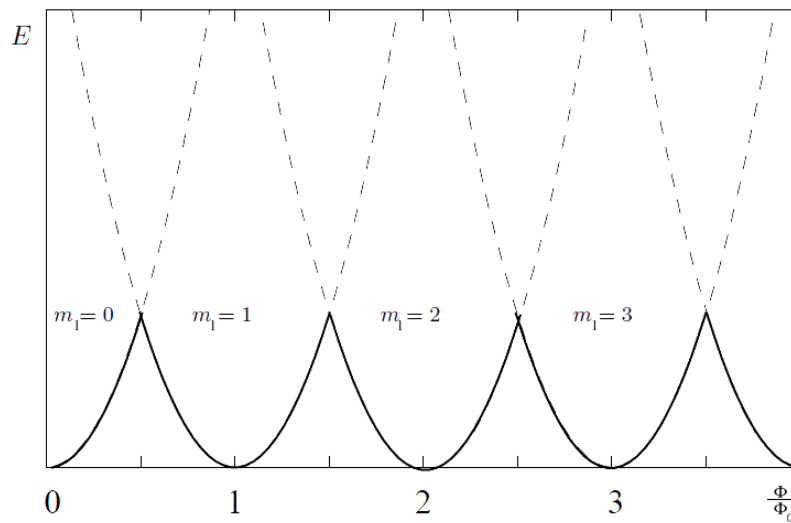


Figura 3.4: Espectro de energia periódico, para um elétron confinado sobre um anel 1D na presença de campo magnético. De acordo com a equação (3.18), associado aos diferentes valores do momento angular m_l temos diferentes origens.[38]

Por fim, qualquer autoestado $\Psi'_{m_l} = e^{i(m_l - \frac{\Phi}{\Phi_0})\varphi}$, terá seus autovalores do momento angular deslocados pelo quantum de fluxo magnético Φ_0 .

3.5 Correntes Persistentes

Como foi visto na secção anterior, os elétrons que estão confinados numa estrutura anelar, são influenciados pelo potencial vetor devido o *efeito Aharonov-Bohm*. Uma consequência direta que se caracteriza como propriedade de um anel quântico são as chamadas *correntes persistentes* ⁶. Diferente do entendimento clássico do eletromagnetismo, este tipo de corrente não é originada por uma fonte de alimentação externa, mas surge na estrutura anelar como um efeito puramente quântico. Não tendo campo magnético na região de confinamento dos elétrons, o potencial vetor, consequentemente o fluxo magnético Φ , é o principal responsável pelo surgimento desse fenômeno. Originalmente observado experimentalmente em anéis em escala micrométrica em 1983 por Markus Büttiker, Yoseph Imry

⁶São chamadas de *persistentes* pois não diminuem a sua intensidade pelo efeito de dissipação, permanecendo atuantes por um longo período de tempo, tanto em materiais supercondutores como em materiais não-supercondutores (“normais”).

e Rolf Landauer[39], este tipo de corrente comumente estudada em materiais metálicos, não pode ser mensurada com a utilização do amperímetro, tendo em vista escala coerente⁷ do sistema, de modo que deve ser medida indiretamente através da magnetização. Outros trabalhos também apresentaram evidências experimentais do surgimento destas correntes como os do grupo AT & T, Bell Laboratories em 1990, grupos de pesquisa de Yale[40] e Stanford[41] em 2009.

Para um anel quântico a corrente persistente é calculada como[33, 42] :

$$I = -c \left(\frac{\partial F}{\partial \Phi} \right) \quad (3.28)$$

onde F é a energia livre de Helmholtz. Por definição, na termodinâmica sabemos que este potencial é definido pela expressão $F = E - TS$, na qual E é a energia interna e S a entropia. Quando o sistema está em $T = 0$, implica que $F \rightarrow E$, assim reescrevemos a equação da corrente como:

$$I = -c \left(\frac{\partial E}{\partial \Phi} \right), \quad (3.29)$$

mas a energia total do sistema é definida como :

$$E = \sum_{m_l} P(E_{m_l}) E_{m_l}, \quad (3.30)$$

onde $P(E_{m_l})$ é a probabilidade de ocupação dos níveis de energia no estado fundamental. Para o limite degenerado, quando $T = 0$, a função $P(E_{m_l})$ assume apenas dois valores:

$$P(E_{m_l}) = \begin{cases} 1, & \text{se } E_{m_l} < \varepsilon_F \\ 0, & \text{se } E_{m_l} > \varepsilon_F \end{cases}, \quad (3.31)$$

onde ε_F é a energia de Fermi. Como o que interessa é o caso em que há ocupação dos níveis de Fermi, ou seja, $E_{m_l} < \varepsilon_F$ podemos, por fim, reescrever a corrente persistente (3.29) como

$$I_{m_l} = - \sum_{m_l} c \left(\frac{\partial E_{m_l}}{\partial \Phi} \right). \quad (3.32)$$

Assim foi desenvolvido nesta secção o conceito de correntes persistentes. Nos próximos capítulos, vamos retornar a esta definição aplicada em contextos diferentes. Na próxima secção veremos um modelo de confinamento em um anel quântico 2D, na presença de um campo magnético.

⁷Escala com estados de mínima incerteza.

3.6 Confinamento do Elétron no Anel Bidimensional(2-D): O Modelo de Tan-Inkson

Como vimos anteriormente, a observação do efeito *Aharonov-Bohm* assim como o surgimento das corrente persistentes, trouxe para a física uma nova luz para a natureza destes fenômenos e, sobretudo, uma interpretação para potencial vetor, que deixou de ser um mero artifício matemático. Contudo as observações experimentais destes fenômenos para modelos em anéis unidimensionais, tem revelado uma nova classe de efeitos, no que diz respeito às propriedades de transporte em sistemas mesoscópicos [43], que não podem ser perfeitamente explicados pela teoria 1-D. Estas complicações, são oriundas principalmente por causa da largura finita do anel⁸. Obter, por exemplo, o espectro eletrônico para elétrons confinados em uma anel semiconductor bidimensional sujeito a um campo magnético só era possível, até então, por extensos cálculos computacionais para resolver numericamente a equação de Schrödinger.

Diante deste panorama, W-C Tan e J.C. Inkson propuseram este modelo que nasceu para atender a necessidade de se ter uma generalização dos demais modelos de confinamento como veremos mais a frente. Para construção deste modelo, vamos considerar um anel bidimensional no plano x-y, o qual é definido pelo potencial radial[8]:

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \quad (3.33)$$

onde $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$, a_1 e a_2 são constantes arbitrárias. Para ter uma visualização deste modelo de anel, vamos assumir que:

$$V_1 = \frac{a_1}{r^2} \quad e \quad V_2 = a_2 r^2, \quad (3.34)$$

onde podemos reescrever (3.33) como:

$$V(r) = V_1 + V_2 - V_0. \quad (3.35)$$

Fazendo o estudo dos casos limites em (3.36) temos que:

- $V_2 \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow 0$ e $V_2 \rightarrow \infty$ quando $r \rightarrow \infty$;
- $V_1 \rightarrow \infty$ quando $r \rightarrow 0$ e $V_1 \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$.

⁸A largura do anel é dado pela diferença entre o raio externo e raio interno de um anel 2-D.

Graficamente a região de ocupação dos elétrons no plano é dada pela sobreposição das regiões V_2 e V_1 , como mostra a figura (3.5), onde no item **c)** temos de fato a forma de um anel 2D.

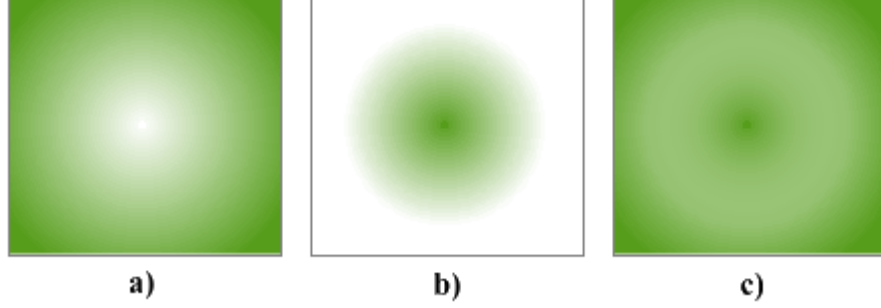


Figura 3.5: Regiões relacionadas a cada potencial no plano x-y. **a)**Representa V_2 , **b)** o potencial V_1 e **c)** a sobreposição $V = V_1 + V_2$.

Outra vantagem deste potencial está na sua versatilidade para descrever diferentes configurações. A partir do potencial original $V(r)$, podemos obter outras formas de confinamento apenas manipulando as constantes a_1 e a_2 , e expandindo a equação (3.33) em torno de um mínimo. Antes disso, vamos tomar a derivada dessa expressão

$$\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{2a_1}{r^3} + 2a_2r, \quad (3.36)$$

e na sequência igualar a mesma a zero, de modo que obtemos:

$$r = r_0 = \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad (3.37)$$

sendo que r_0 é o ponto mínimo da função $V(r)$ e também o raio médio do anel. Fazendo a expansão em Taylor de $V(r)$ em $r = r_0$ temos :

$$V(r) = V(r_0) + \left(\frac{dV}{dr}\right)_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_{r=r_0} (r - r_0)^2 + \dots \quad (3.38)$$

O passo seguinte é substituir a função $V(r)$ e suas derivadas de primeira e segunda ordem, calculadas no ponto r_0 , considera-se apenas os primeiros três termos da série, obtém-se:

$$V(r) \approx \frac{1}{2} 8a_2 (r - r_0)^2 \quad (3.39)$$

que é a expressão aproximada do potencial de Tan-Inkson na vizinhança do raio médio do anel. Entretanto, será feito a seguinte manipulação:

$$V(r) \approx \frac{1}{2}m^* \left(\frac{8a_2}{m^*} \right) (r - r_0)^2 \approx \frac{1}{2}m^*\omega_0^2(r - r_0)^2, \quad (3.40)$$

que é exatamente a expressão para um oscilador harmônico de massa m^* (efetiva)⁹, frequência $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{m^*}}$ e posição de equilíbrio r_0 . Logo no anel obtido pelo potencial Tan-Inkson, o elétron executa um movimento radial harmônico simples, em torno do raio médio r_0 .

Assim de modo geral temos as seguintes formas de confinamento:

- Em (3.33) fazendo $a_2 = 0$ temos $V(r) \rightarrow V_1(r) = \frac{a_1}{r^2}$ que é o potencial de confinamento de um antiponto quântico¹⁰;
- Em (3.33) fazendo $a_1 = 0$ temos $V(r) \rightarrow V_2(r) = a_2 r^2$ que é o potencial de confinamento de um ponto quântico¹¹;
- Em (3.40) fazendo $a_2 \rightarrow \infty$ ($\omega_0 \rightarrow \infty$), matendo r_0 fixo temos os anel 1-D, pois ω_0 é frequência com que o e elétron oscila em torno do raio médio r_0 : para o limite $\omega_0 \rightarrow \infty$, o período da oscilação vai zero, caracterizando a região de confinamento como unidimensional, logo um anel 1-D.
- Em (3.40) fazendo $r_0 \rightarrow \infty$ e ω_0 constante, temos um fio esticado 2-D infinito, pois, uma reta pode ser vista como uma circunferência de raio infinito.

A largura desse modelo de anel é estimada a partir da energia de Fermi E_f , [8] que é dado por:

$$r_{\pm} = \left(\frac{V_0 + E_f \pm \sqrt{2E_f V_0 + E_f^2}}{2a_2} \right)^{1/2}, \quad (3.41)$$

⁹No artigo [8], a notação de massa efetiva é dado pela letra “ μ ”contudo, neste trabalho, esta letra vai se referir a uma transformação de variável nos próximos capítulos.

¹⁰“Antidot”: Sistemas que constituem um vácuo quântico, localizados em semicondutores finos.[44]

¹¹“Quantum Dots”: Porção de Matéria,(exemplo: semicondutores) na qual os buracos e elétrons estão confinadas em todas as três dimensões espaciais. Por causa dessa diminuta dimensionalidade, essas estruturas têm propriedades eletrônicas intermediárias entre as de semicondutores macroscópicos e aquelas de moléculas discretas.[45]

onde r_+ e r_- se referem ao raio externo e interno respectivamente. Para baixas energias de Femi, $E_f \ll V_0$, e usando a frequência ω_0 , chega-se à largura aproximada do anel:

$$\Delta r = r_+ - r_- = \sqrt{\frac{8E_f}{m^*\omega_0^2}}. \quad (3.42)$$

A partir deste modelo, Tan e Inkson conseguiram resolver analiticamente a equação de Schrödinger para um elétron confinado em um anel 2-D, na presença de um campo magnético uniforme perpendicular ao plano do anel com um fluxo magnético infinito (fluxo *Aharonov-Bohm*) concentrado no centro desta estrutura. O potencial vetor responsável por esta configuração foi escolhido como:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}Br\hat{e}_\varphi + \left(\frac{\ell\hbar}{er}\right)\hat{e}_\varphi, \quad (3.43)$$

onde ℓ mede o número de fluxo magnético $\Phi = \ell\Phi_0$ ($\Phi_0 = hc/e$) que passa através do centro do anel e, além disso, o spin do elétron foi ignorado.

O hamiltoniano de um elétron com massa efetiva m^* confinado neste modelo, num plano $x - y$ é calculado como:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\ell \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\ell \right) + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 \right] + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0. \quad (3.44)$$

O espectro de energia associado a este hamiltoniano é:

$$E_{n,m_l} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) \hbar\omega - \frac{m_l - \ell}{2} \hbar\omega_c - \frac{m^*}{4} \omega_0^2 r_0^2, \quad (3.45)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$ é o número quântico associado ao movimento radial enquanto que $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ com o momento angular. Devido a interação dos elétrons com o campo magnético, há uma frequência ciclotrônica efetiva semelhante à teoria clássica dada por:

$$\omega = \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}, \quad (3.46)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ é a frequência ciclotrônica clássica e ω_0 é, como vimos, a frequência do oscilador harmônico. No mesmo trabalho, foi obtido também a autofunção do sistema:

$$\Psi_{n,m_l}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma[n + M + 1]}{2^{M+1} n! (\Gamma[M + 1])^2 \pi} \right) \times e^{-im_l \varphi} e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^M {}_1F_1 \left(-n, M + 1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2 \right), \quad (3.47)$$

onde ${}_1F_1$ é a equação hipergeométrica confluyente (ver apêndice A), com parâmetro e comprimento magnético renormalizado respectivamente:

$$M = \sqrt{(m - \ell)^2 + \frac{2a_1 m^*}{\hbar^2}} \quad e \quad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega}} . \quad (3.48)$$

A diferença deste modelo 2-D para o anel 1-D, está justamente na atuação do fluxo *Aharonov-Bohm*. Como foi visto, no caso unidimensional surge uma dependência parabólica nas autoenergias (3.18) em função do fluxo, consequência da mudança na fase da função de onda. Já no caso bidimensional de Tan-Inkson, na equação (3.45) e (3.48), o fluxo *Aharonov-Bohm* sobre os autoestados muda o número quântico de m_l para $m_l - \ell$ e, além disso, não muda apenas a fase, mas também a trajetória de seus estados eletrônicos, resultando em uma dependência não parabólica para as autoenergias com relação ao fluxo[8].

Assim, revisamos os dois casos essenciais de confinamentos anelares, com descrições analíticas conhecidas na literatura, bem como o conceito de correntes persistentes. Todos esses conceitos servirão de base na abordagem que vem a seguir: o modelo de confinamento anelar 2-D para partículas relativísticas .

Capítulo 4

Confinamento de Partículas

Relativísticas para um Anel 2-D

Neste capítulo inicialmente será feita uma rápida revisão sobre o acoplamento divulgado na literatura como *oscilador de Dirac*, o qual permite recuperar, para partículas relativísticas de spin $1/2$, a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico simples no limite não relativístico. Em seguida, será revisado a proposta de acoplamento desenvolvida por K. Bakke e C. Furtado inspirada no *oscilador de Dirac*, para estudar o confinamento de uma partícula de spin $1/2$, em um anel 2-D, em sistemas da matéria condensada descritos pela equação de Dirac. Este acoplamento será utilizado na equação de Dirac em coordenadas curvilíneas proposta por Fock, onde também será considerado a presença do fluxo *Aharonov-Bohm* na estrutura anelar. Diante deste panorama, será calculado o espectro de energia assim como as correntes persistentes. Por fim será feito o limite não relativístico para ambos resultados, mostrando que esse novo acoplamento é uma possível generalização do modelo de Tan-Inkson, conhecido para o caso quântico.

4.1 Oscilador de Dirac e o Acoplamento Bakke-Furtado

Em estudos feitos a respeito da interação de uma partícula relativística de spin $1/2$ com o potencial do oscilador harmônico simples, constatou-se que havia a impossibilidade de recuperar o hamiltoniano do oscilador harmônico no limite relativístico da equação de Dirac. Entretanto esse problema foi contornado em 1989, com o trabalho de Moshinsky e Szczeplaniak [46], que introduziu um novo acoplamento ao momento $\mathbf{p}$ na equação

de Dirac, de maneira a recuperar no limite não relativístico o hamiltoniano do oscilador harmônico simples, com um forte acoplamento spin-órbita. Este novo acoplamento ficou conhecido na literatura por *oscilador de Dirac* e é definido como:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - im\omega\rho\gamma^0\hat{e}_\rho, \quad (4.1)$$

onde m e ω são a massa e a frequência do oscilador respectivamente. Com o desenvolvimento deste acoplamento, este formalismo vem sendo bastante usado para descrever as propriedades de sistemas físicos em óptica quântica[47], termodinâmica [48] e em sistemas de baixas dimensionalidades [49].

Fundamentados nesta proposta do *oscilador de Dirac*, K. Bakke e C. Furtado, em 2012, desenvolveram um modelo de anel quântico bidimensional com o objetivo de estudar o confinamento de uma partícula de spin 1/2, em sistemas da matéria condensada descritos pela equação de Dirac, no caso sistemas ultrarelativísticos de quasipartículas¹ onde a relação de dispersão de energia é linear com respeito a velocidade da quasepartícula². Baseados na equação (4.1) foi proposto o seguinte acoplamento[6]:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + i \left[\frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} + \sqrt{2ma_2\rho} \right] \gamma^0\hat{e}_\rho, \quad (4.2)$$

onde a_1 e a_2 são parâmetros de controle. Este acoplamento caracteriza-se, como veremos mais a frente, como uma possível generalização relativística para o modelo Tan-Inkson.

4.2 O Hamiltoniano de Dirac no Anel 2-D

Neste secção, desejamos obter o hamiltoniano de Dirac na presença do potencial de confinamento (4.2). Como se trata de um anel quântico, vamos considerar para o sistema uma simetria cilíndrica, onde vamos utilizar a equação de Dirac com coordenadas curvilíneas proposta por Fock(1929)[50] :

$$i\gamma^\mu D_\mu \Psi + \frac{i}{2} \sum_{k=1}^3 \gamma^k \left[D_k \ln \left(\frac{h_1 h_2 h_3}{h_k} \right) \right] \Psi = m\Psi, \quad (4.3)$$

onde foi considerado $c = \hbar = 1$ (unidades naturais) e $k = 1, 2, 3$. Na equação (4.3), $D_\mu = \frac{1}{h_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ é a derivada correspondente ao sistema de coordenadas e os parâmetros

¹São sistemas, que dentro de situações específicas, apresentam partículas emergentes decorrentes das perturbações do meio. Exemplo: Os fônons que aparecem devido a vibração dos átomos da rede cristalina.

²Por exemplo o grafeno como foi visto no capítulo 2.

h_k são os fatores de escala. Para a simetria cilíndrica, a métrica no espaço-tempo de Minkowski é escrito como:

$$ds^2 = -dt^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + dz^2, \quad (4.4)$$

de onde tiramos os fatores de escala $h_0 = 1$, $h_1 = 1$, $h_2 = \rho$ e $h_3 = 1$ e as respectivas coordenadas associadas $x^0 = t$, $x^1 = \rho$, $x^2 = \varphi$ e $x^3 = z$.

Antes de prosseguir com o cálculo é importante falar um pouco a respeito do grupo de matrizes $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i)$, visto que serão úteis na obtenção da solução. Estas matrizes, definidas pela mecânica quântica relativística, são conhecidas como matrizes de Dirac [51] e são definidas da seguinte maneira:

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \hat{\beta}\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Observe que esse conjunto de matrizes 4x4 estão relacionadas com as matrizes 2x2, identidade I e as matrizes de Pauli, respectivamente. As matrizes $\hat{\alpha}^i (i = 1, 2, 3)$ e $\hat{\beta}$ satisfazem as propriedades:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j + \hat{\alpha}^j \hat{\alpha}^i = 2\delta_{ij} I \\ \hat{\alpha}^i \hat{\beta} = -\hat{\beta} \hat{\alpha}^i \\ \hat{\alpha}^{i2} = \hat{\beta}^2 = I \end{cases}. \quad (4.6)$$

Com posse dos fatores de escalas e das coordenadas, substituindo na equação (4.3) obtemos:

$$i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\gamma^1 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + i\frac{\gamma^2}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + i\gamma^3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{i\gamma^1}{2\rho} \Psi = m\Psi. \quad (4.7)$$

Usando as propriedades das matrizes definidas em (4.5) e (4.6) podemos reescrever a equação a cima como:

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \beta m\Psi + \left[-i\alpha^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right) - \frac{i\alpha^2}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - i\alpha^3 \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \Psi, \quad (4.8)$$

de modo que, se compararmos esta expressão com uma equação tipo Schröndiger

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (4.9)$$

temos o hamiltoniano tipo Dirac, $\hat{H} = (\hat{\alpha}\mathbf{p} + m\beta)$ onde o momento $\mathbf{p}$ é escrito em termos de suas componentes:

$$\mathbf{p} = (p_\rho, p_\varphi, p_z) = \left[-i \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right), -\frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right]. \quad (4.10)$$

A idéia agora é fazer o acoplamento mínimo do momento com o potencial vetor obtido no capítulo anterior $\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi\rho} \hat{e}_\varphi$, com Φ sendo o fluxo magnético, pois é o fluxo Aharonov-Bohm, o qual permite o surgimento de correntes persistentes, no caso não relativístico. Esse acoplamento será feito pelo momento cinemático

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - |q|\mathbf{A}, \quad (4.11)$$

de maneira que, o hamiltoniano na presença do campo magnético é escrito como:

$$\hat{H}_B = \hat{\alpha}\mathbf{\Pi} + m\hat{\beta}. \quad (4.12)$$

Assim, usando o acoplamento (4.2) no momento (4.10) e utilizando a definição de momento cinemático, reescrevemos o hamiltoniano na presença do campo magnético como:

$$\hat{H}_B = \left[-i\alpha^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} - \hat{\beta} \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} - \hat{\beta} \sqrt{2ma_2\rho} \right) - \frac{i\alpha^2}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) - i\alpha^3 \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (4.13)$$

com $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$. Com posse desse hamiltoniano, na próxima secção vamos calcular o espectro de energia para a partícula de spin 1/2 para o modelo de confinamento apresentado.

4.3 Espectro de Energia da Partícula de Spin 1/2

Usando o hamiltoniano (4.13) na equação (4.9) e considerando o *ansatz*

$$\Psi = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \eta \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

onde $\eta = \eta(\rho, \varphi, z)$ e $\chi = \chi(\rho, \varphi, z)$ são biespinores, e utilizando as propriedades das matrizes (4.5) e (4.6) temos como resultado duas equações acopladas. A primeira para η :

$$(E - m)\eta = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} + \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} + \sqrt{2ma_2\rho} \right] \chi - i\frac{\sigma^2}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \chi - i\sigma^3 \frac{\partial \chi}{\partial z}, \quad (4.15)$$

e a segunda para χ :

$$(E + m)\chi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} - \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} - \sqrt{2ma_2}\rho \right] \eta - i\frac{\sigma^2}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \eta - i\sigma^3 \frac{\partial \eta}{\partial z} . \quad (4.16)$$

Para desacoplar estas equações, vamos substituir (4.16) em (4.15) de maneira que queremos eliminar χ . Nesta substituição serão utilizadas as propriedades das matrizes de Pauli (2.25) de modo que obtemos:

$$\begin{aligned} (E^2 - m^2)\eta = & -\frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial \rho} + \frac{\eta}{4\rho^2} - \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho^2} \eta + \sqrt{2ma_2} \eta + i\frac{\sigma^3}{\rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + \frac{2ma_1}{\rho^2} \eta \\ & + 4m\sqrt{a_1 a_2} \eta - 2i\sigma^3 \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\sigma^3 \frac{\Phi}{\Phi_0} \frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho^2} \eta + 2ma_2 \rho^2 \eta \\ & - 2i\sigma^3 \sqrt{2ma_2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\frac{\Phi}{\Phi_0} \sqrt{2ma_2} \sigma^3 \eta + \frac{\Phi}{\Phi_0} \frac{\sigma^3}{\rho^2} \eta - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho^2} \\ & + \left(\frac{\Phi}{\Phi_0 \rho} \right)^2 \eta + 2i\frac{\Phi}{\Phi_0 \rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + 2i\sigma^2 \frac{\partial \eta}{\partial z} \left(\frac{\sqrt{2ma_1}}{\rho} + \sqrt{2ma_2} \rho \right) - \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Como a partícula está confinada no plano do anel, z é fixo e consequentemente $\frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = 0$. Na equação (4.17) é possível perceber que η é autofunção de σ^3 cujo os autovalores são $s = \pm 1$, de onde podemos escrever $\sigma^3 \eta_s = \pm \eta_s = s\eta$. Outra coisa que podemos perceber é que os operadores $\hat{J}_z = -i\frac{\partial}{\partial \varphi}$ e $\hat{p}_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$, comutam com o hamiltoniano do lado direito da equação (4.17), ou seja, são grandezas compatíveis e consequentemente η é autoestado simultâneo destes operadores.³ Assim podemos escrever a solução para esta equação que depende apenas da coordenada radial ρ como:

$$\eta = e^{ij\varphi} e^{ikz} \begin{pmatrix} R_+(\rho) \\ R_-(\rho) \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

onde $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e k uma constante qualquer. Para z fixo, no sistema vamos considerar $k = 0$. Substituindo a equação (4.18) em (4.17) de maneira que:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \rho} = e^{ij\varphi} \begin{pmatrix} \frac{\partial R_+(\rho)}{\partial \rho} \\ \frac{\partial R_-(\rho)}{\partial \rho} \end{pmatrix}; \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho^2} = e^{ij\varphi} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 R_+(\rho)}{\partial \rho^2} \\ \frac{\partial^2 R_-(\rho)}{\partial \rho^2} \end{pmatrix};$$

³Prova rápida: $[H, \hat{J}_z]\eta = -(E^2 - m^2)i\partial_\varphi \eta + i\partial_\varphi(E^2 - m^2)\eta = 0$
 $[\hat{p}_z, \hat{H}]\eta = -i\partial_z(E^2 - m^2)\eta + (E^2 - m^2)i\partial_z \eta = 0$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \varphi} = ie^{ij\varphi} \begin{pmatrix} l + \frac{1}{2} \\ R_-(\rho) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_+(\rho) \\ R_-(\rho) \end{pmatrix}; \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial \varphi^2} = - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{ij\varphi} \begin{pmatrix} R_+(\rho) \\ R_-(\rho) \end{pmatrix};$$

e usando $\sigma^3 \eta_s = \pm \eta_s = s \eta$, a propriedade das matrizes de Pauli $\sigma^i \sigma^i = I$ e a notação $R_s(\rho) = (R_+(\rho), R_-(\rho))$, temos simplesmente:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\tau_s}{\rho^2} - 2ma_2\rho^2 + \nu_s \right] R_s(\rho) = 0 \quad (4.19)$$

que é a equação que descreve o movimento de uma partícula confinada em um anel geométrico. Os parâmetros τ_s , ζ_s e ν_s são definidos como:

$$\begin{cases} \tau_s = \zeta_s + s\sqrt{2ma_1} \\ \zeta_s = l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0} \\ \nu_s = E^2 + m^2 - 2s\sqrt{2ma_2}\zeta_s - 2\sqrt{2ma_2} - 4m\sqrt{a_1a_2} \end{cases} . \quad (4.20)$$

A equação (4.19) é uma equação diferencial de segunda ordem e antes de resolvê-la, vamos fazer a mudança de variável

$$\mu = \sqrt{2ma_2}\rho^2, \quad (4.21)$$

de maneira que obtemos

$$\left[\mu \frac{d^2}{d\mu^2} + \frac{d}{d\mu} - \frac{\tau_s^2}{4\mu} - \frac{\mu}{4} + \frac{\nu_s}{4\sqrt{2ma_2}} \right] R_s(\mu) = 0 . \quad (4.22)$$

Para corresponder as expectativas do modelo, a solução pra equação a cima deve ser regular na origem e finita em qualquer lugar⁴, ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $\rho \rightarrow \infty$. A função que satisfaz essas condições tem a forma

$$R_s(\mu) = e^{\frac{-\mu}{2}} \mu^{\frac{|\tau_s|}{2}} F_s(\mu). \quad (4.23)$$

Substituindo esta equação na anterior(4.22) obtemos:

$$\mu \frac{d^2 F_s}{d\mu^2} + [|\tau_s| + 1 - \mu] \frac{dF_s}{d\mu} + \left[\frac{\nu_s}{4\sqrt{2ma_2}} - \frac{|\tau_s|}{2} - \frac{1}{2} \right] F_s(\mu) = 0 \quad (4.24)$$

que corresponde a equação da hipergeométrica confluyente (ver Apêndice A.1), com solução:

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1 \left(\frac{|\tau_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{4\sqrt{2ma_2}}, |\tau_s| + 1, \mu \right). \quad (4.25)$$

⁴A função $f(x)$ pode ser finita, mas se $f(x+1) > f(x)$, e $f(x+2) >> f(x+1)$, a função irá divergir.

Agora para obter uma solução finita para qualquer lugar, vamos impor a condição onde a solução de série hipergeométrica torne-se um polinômio de grau n , (Ver Apêndice A.2) que é

$$\frac{|\tau_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\nu_s}{4\sqrt{2ma_2}} = -n. \quad (4.26)$$

A partir desta equação, substituindo os parâmetros (4.20), chegamos na expressão do espectro, escrita como

$$E_{n,l}^2 = m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0} + s\sqrt{2ma_1}|}{2} \right] + 4\sqrt{2ma_2} \left[s \frac{(l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0})}{2} + 1 \right] + 4m\sqrt{a_1a_2}, \quad (4.27)$$

podendo ser reescrita ainda como

$$E_{n,l}^2 = m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + 4m\sqrt{a_1a_2}, \quad (4.28)$$

que é o espectro dos estados ligados de uma partícula carregada de spin $1/2$ confinada em um anel quântico 2-D em um sistema descrito pela equação de Dirac na presença do fluxo magnético.

4.4 Correntes Persistentes para o Fluxo Aharonov-Bohm

Como foi visto no capítulo anterior, o cálculo da corrente persistente é definido pela taxa de variação dos valores do espectro energético pelo fluxo Aharonov-Bohm

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \Phi}, \quad (4.29)$$

onde $E_{n,l}$ é o valor do espectro de energia. Derivando a equação (4.27) temos:

$$\frac{\partial E_{n,l}}{\partial \Phi_0} = - \frac{\sqrt{2ma_2}}{\Phi_0} \left(\frac{\pm \tau_s}{|\tau_s|} + 1 \right) \times \left\{ m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s \frac{\zeta_s}{2} + 1 \right] + 4m\sqrt{a_1a_2} \right\}^{-1/2}.$$

Substituindo a expressão acima em (4.29), e lembrando que $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$, temos o valor da corrente persistente pra este sistema:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2ma_2} \left(\frac{\pm\tau_s}{|\tau_s|} + 1 \right) \times \left\{ m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s\frac{\zeta_s}{2} + 1 \right] + 4m\sqrt{a_1a_2} \right\}^{-1/2}. \quad (4.30)$$

Temos assim uma equação para a corrente persistente que depende dos parâmetros de controle a_1 , a_2 e dos números quânticos n e l .

4.5 O Limite Não Relativístico

A partir da equação (4.28) vamos escrever apenas as energias positivas da seguinte forma:

$$E_{n,l} = m \left(1 + \frac{4}{m} \sqrt{\frac{2a_2}{m}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s\frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + \frac{4}{m} \sqrt{a_1a_2} \right)^{\frac{1}{2}} = m(1 + \tilde{\mu})^{\frac{1}{2}}, \quad (4.31)$$

com

$$\tilde{\mu} \equiv \frac{4}{m} \sqrt{\frac{2a_2}{m}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s\frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + \frac{4}{m} \sqrt{a_1a_2}.$$

No termo entre parênteses, fazendo a expansão do binômio para $\tilde{\mu}$ até primeira ordem, tal que $(1 + \tilde{\mu})^{\frac{1}{2}} \approx (1 + \frac{1}{2}\tilde{\mu})$ obtemos:

$$E_{n,l} \approx m + \sqrt{\frac{8a_2}{m}} \left[n + \frac{|\tau_s|}{2} + s\frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] + 2\sqrt{a_1a_2} \quad (4.32)$$

onde foi escolhida a expansão em torno da massa do corpo até primeira ordem⁵. Nesta aproximação recuperamos a frequência do modelo de Tan-Inkson com dependência do parâmetro a_2 , ou seja $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{m}}$. Nota-se também que o espectro é periódico no fluxo $\Phi \rightarrow \Phi - \Phi_0$, de maneira que, $E_{n,l}(\Phi - \Phi_0) = E_{n,l+1}(\Phi)$. Sendo o espectro periódico também há correntes persistentes, que neste limite são dadas por:

$$I \approx \frac{|q|}{4\pi} \sum_{n,l} \sqrt{\frac{8a_2}{m}} \left[\frac{\tau_s}{|\tau_s|} + 1 \right] \quad (4.33)$$

onde foi feita a expansão em Taylor em torno da massa até os termos de ordem $\mathcal{O}(m^{-2})$ na equação (4.28). Este resultado também está de acordo com o modelo de Tan-Inkson, se

⁵Como se trata do limite não relativístico, uma boa aproximação consiste em expandir em torno da massa própria do sistema m , pois $m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$, para $c \gg v$ então $m \approx m_0$. Ver a referência [52].

consideramos uma partícula quântica de spin $1/2$. Apesar de está implícito no parâmetro τ , essa corrente também é periódica.

O fato é que o acoplamento Bakke-Furtado, permitiu escrever tanto o espectro, como a corrente persistente para uma partícula de spin $1/2$ em termos dos parâmetros a_1 e a_2 . A partir disto, assim como no modelo de Tan-Inkson, temos a possibilidade de obter sistemas de confinamento relativísticos equivalentes aos sistemas não relativísticos, como pontos quântico e antipontos quânticos.

Fazendo $a_1 = 0$ é recuperado o oscilador de Dirac. Para sistemas em matéria condensada regidos pela equação de Dirac, tomando $a_1 = 0$ em (4.27) e (4.29), temos o espectro de uma partícula de spin $1/2$ confinada para o ponto quântico:

$$E_{n,l}^2 = m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|\zeta_s|}{2} + s\frac{(\zeta_s)}{2} + 1 \right] \quad (4.34)$$

bem como a corrente persistente para este tipo associada ao ponto quântico :

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2ma_2} \left(\frac{\pm\zeta_s}{|\zeta_s|} + 1 \right) \times \left\{ m^2 + 4\sqrt{2ma_2} \left[n + \frac{|\zeta_s|}{2} + s\frac{\zeta_s}{2} + 1 \right] \right\}^{-1/2}. \quad (4.35)$$

A partir destes dois resultados, também é trivial obter no limite não relativístico os níveis de energia e a corrente persistente, via expansão de Taylor em torno da massa, como foi feito anteriormente, recuperando resultados compatíveis com o modelo Tan-Inkson. Fazendo $a_2 = 0$ que seria o equivalente ao antiponto quântico, é perceptível que não há estados ligados.

Capítulo 5

Modelo de Confinamento para Quasipartículas no Grafeno

Neste capítulo será exposto um novo modelo de acoplamento inspirado no modelo Bakke-Furtado, visto no capítulo anterior, com o objetivo de estudar o confinamento de uma quasipartícula no grafeno numa estrutura anelar 2-D, sujeita a um fluxo *Aharonov-Bohm*. Neste caminho, serão calculados o espectro de energia e a corrente persistente assim como os espinores de energia positiva para o grafeno em duas situações: para uma folha de grafeno plana (sem defeito) e para uma folha de grafeno com o defeito topológico do tipo desclinação, obtido via processo de *Volterra*. A segunda parte deste capítulo é uma aplicação deste novo modelo de acoplamento no trabalho desenvolvido por Maria Jannaira Bueno em 2011, que investigou as propriedades eletrônicas do grafeno na presença do defeito topológico do tipo desclinação. Por fim será mostrado que os resultados obtidos para o caso do grafeno com defeito recaem no caso sem defeito, mostrando que esses resultados são coerentes e descrevem, de fato, duas aplicações para o novo acoplamento de forma bastante consistente.

5.1 Nova Proposta de Acoplamento

Como foi visto no segundo capítulo deste trabalho, o grafeno é um cristal bidimensional, semicondutor com “gap” nulo, onde os portadores de cargas se comportam como se não tivessem massa. Nesta dinâmica peculiar, no limite de baixas energias, este material pode ser descrito pela equação de Dirac sem massa, em contraste com os semicondutores,

cujos portadores de cargas têm massa. A dificuldade de trabalhar no grafeno está na tentativa de confinar os elétrons na presença de potencial externo, devido ao tunelamento dos mesmos. Para contornar esta situação, propomos um modelo de anel quântico 2-D fenomenológico, semelhante ao acoplamento desenvolvido por K. Bakke, C. Furtado, visto no capítulo anterior, definido como:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + i \left[\frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} + \sqrt{2a_2\rho} \right] \gamma^0 \hat{e}_\rho, \quad (5.1)$$

onde a diferença desta equação para a (4.2), está justamente na ausência da massa. Com uso deste acoplamento, vamos investigar duas situações específicas em que a partícula está confinada em um anel 2-D: a folha plana de grafeno e uma folha de grafeno com defeito topológico do tipo desclinação, ambos sujeitos a um campo magnético perpendicular e a um fluxo *Aharonov-Bohm*.

5.2 Confinamento para a Folha de Grafeno Plana via Anel 2-D

5.2.1 O Hamiltoniano do Grafeno

Na ausência de massa, $m = 0$, para uma folha perfeitamente plana de grafeno, vamos trabalhar com a equação de Fock para coordenadas cilíndricas escrita da seguinte forma:

$$i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\gamma^1 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + i\frac{\gamma^2}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + i\gamma^3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{i\gamma^1}{2\rho} \Psi = 0. \quad (5.2)$$

A partir desta equação, e levando em consideração as propriedades das matrizes γ em (4.5), e das matrizes $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ em (4.6), temos a equação tipo Schrödinger:

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-i\alpha^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right) - \frac{i\alpha^2}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - i\alpha^3 \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \Psi, \quad (5.3)$$

de onde escrevemos o hamiltoniano tipo Dirac apenas como $\hat{H} = \hat{\alpha}\mathbf{p}$. Novamente fazendo o acoplamento pelo momento cinemático $\Pi = \mathbf{p} - |q|\mathbf{A}$, e substituímos no lugar de $\mathbf{p}$, de maneira que $\hat{H} = \hat{\alpha}(\mathbf{p} - |q|\mathbf{A})$.

Assim o hamiltoniano do grafeno na presença do campo magnético com nosso acoplamento (5.1) será escrito como:

$$\hat{H}_B = \left[-i\alpha^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} - \hat{\beta} \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} - \hat{\beta} \sqrt{2a_2\rho} \right) - \frac{i\alpha^2}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\frac{\Phi}{\Phi_0} \right) - i\alpha^3 \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (5.4)$$

com Φ sendo o fluxo *Aharonov-Bohm* e $\Phi_0 = \frac{2\pi}{|q|}$ o quantum de fluxo magnético.

5.2.2 Espectro de Energia da Quasipartícula

Usando este operador no *ansatz* (4.14)

$$\Psi = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \eta \\ \chi \end{pmatrix},$$

onde os espinores η e χ agora represetam cada sub-rede da folha de grafeno, vamos assim obter duas equações acopladas. A primeira para η

$$\begin{aligned} E\eta = & -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} + \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} + \sqrt{2a_2\rho} \right] \chi \\ & -i\frac{\sigma^2}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \chi - i\sigma^3 \frac{\partial \chi}{\partial z} \end{aligned} \quad (5.5)$$

e a segunda para χ

$$\begin{aligned} E\chi = & -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} - \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} - \sqrt{2a_2\rho} \right] \eta \\ & -i\frac{\sigma^2}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \eta - i\sigma^3 \frac{\partial \eta}{\partial z}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Para desacoplar estas equações, vamos substituir (5.6) em (5.5) de maneira que queremos eliminar χ . Nesta substituição serão utilizadas as propriedades das matrizes de Pauli (2.25) de maneira que obtemos:

$$\begin{aligned} E^2\eta = & -\frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial \rho} + \frac{\eta}{4\rho^2} - \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho^2} \eta + \sqrt{2a_2} \eta + i\frac{\sigma^3}{\rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + \frac{2a_1}{\rho^2} \eta \\ & + 4\sqrt{a_1 a_2} \eta - 2i\sigma^3 \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\sigma^3 \frac{\Phi}{\Phi_0} \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho^2} \eta + 2a_2 \rho^2 \eta \\ & - 2i\sigma^3 \sqrt{2a_2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\frac{\Phi}{\Phi_0} \sqrt{2a_2} \sigma^3 \eta + \frac{\Phi}{\Phi_0} \frac{\sigma^3}{\rho^2} \eta - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho^2} \\ & + \left(\frac{\Phi}{\Phi_0 \rho} \right)^2 \eta + 2i\frac{\Phi}{\Phi_0 \rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + 2i\sigma^2 \frac{\partial \eta}{\partial z} \left(\frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} + \sqrt{2a_2\rho} \right) - \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Para a partícula confinada no plano do anel, z é fixo portanto $\frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = 0$. Na equação (5.7), η é autofunção de σ^3 cujo os autovalores são $s = \pm 1$, de onde podemos escrever $\sigma^3 \eta_s = \pm \eta_s = s\eta$. Novamente os operadores $\hat{J}_z = -i\frac{\partial}{\partial \varphi}$ e $\hat{p}_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$ comutam com o hamiltoniano do lado direito da equação (5.7), ou seja, são grandezas compatíveis e consequentemente η é autoestado simultâneo destes operadores. Do mesmo modo a solução desta equação, dependente apenas da coordenada radial ρ , logo:

$$\eta = e^{ij\varphi} e^{ikz} \begin{pmatrix} R_+(\rho) \\ R_-(\rho) \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

onde $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e k uma constante qualquer. Sendo z fixo, no sistema vamos considerar $k = 0$. Substituindo a equação (5.8) em (5.7) para as derivadas ∂_η ,

$\partial_{\eta\eta}$, ∂_φ , $\partial_{\varphi\varphi}$, usando $\sigma^3\eta_s = \pm\eta_s = s\eta$, a propriedade das matrizes de Pauli $\sigma^i\sigma^i = I$ e a notação $R_s(\rho) = (R_+(\rho), R_-(\rho))$ obtemos:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\vartheta_s^2}{\rho^2} - 2a_2\rho^2 + \varepsilon_s \right] R_s(\rho) = 0 \quad (5.9)$$

com parâmetros ϑ_s , ς_s e ε_s redefinidos como:

$$\begin{cases} \vartheta_s = \varsigma_s + s\sqrt{2a_1} \\ \varsigma_s = l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0} \\ \varepsilon_s = E^2 - 2s\sqrt{2a_2}\varsigma_s - 2\sqrt{2a_2} - 4\sqrt{a_1a_2} \end{cases} \quad (5.10)$$

Para resolver equação (5.9), que é uma equação diferencial de segunda ordem, façamos primeiramente a mudança de variável

$$\varrho = \sqrt{2a_2}\rho^2, \quad (5.11)$$

de maneira que reparametrizando (5.9) chegamos no seguinte aspecto:

$$\left[\varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{d}{d\varrho} - \frac{\vartheta_s^2}{4\varrho} - \frac{\varrho}{4} + \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} \right] R_s(\varrho) = 0. \quad (5.12)$$

Neste modelo desenvolvido aqui, a solução para equação acima deve ser regular na origem e finita em qualquer lugar, ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $\rho \rightarrow \infty$. A função que satisfaz essas condições tem a forma

$$R_s(\varrho) = e^{\frac{-\varrho}{2}} \varrho^{\frac{|\vartheta_s|}{2}} F_s(\varrho), \quad (5.13)$$

de maneira que, fazendo a substituição desta equação na anterior (5.12), obtemos:

$$\varrho \frac{d^2 F_s}{d\varrho^2} + [|\vartheta| + 1 - \varrho] \frac{dF_s}{d\varrho} + \left[\frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} - \frac{|\vartheta_s|}{2} - \frac{1}{2} \right] F_s(\varrho) = 0, \quad (5.14)$$

que corresponde a equação da hipergeométrica confluyente (ver Apêndice A.1), com solução

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1\left(\frac{|\vartheta_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}}, |\vartheta_s| + 1, \varrho\right). \quad (5.15)$$

Agora para obter uma solução finita em qualquer lugar, vamos impor a condição onde a solução de série hipergeométrica torne-se um polinômio de grau n , (Ver Apêndice A.2) que é:

$$\frac{|\vartheta_s|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} = -n. \quad (5.16)$$

A partir desta equação, substituindo os parâmetros (5.10), obtemos o espectro de energia, para a quasipartícula confinada no anel 2-D sobre a folha plana de grafeno:

$$E_{n,l}^2 = 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0} + s\sqrt{2a_1}|}{2} \right] + 4\sqrt{2a_2} \left[s \frac{(l + \frac{1}{2}(1-s) - \frac{\Phi}{\Phi_0})}{2} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1a_2}, \quad (5.17)$$

podendo ser ainda reescrito, em termo dos parâmetros (5.10) como:

$$E_{n,l}^2 = 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\vartheta_s|}{2} + s\frac{\varsigma_s}{2} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1a_2} \quad (5.18)$$

onde $s = +1$ corresponde a sub-rede A, e $s = -1$ corresponde a sub-rede B.

5.2.3 Cálculo de Correntes Persistentes na Folha Plana de Grafeno

O cálculo da corrente persistente, como visto anteriormente, é definido como:

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \Phi} \quad (5.19)$$

onde $E_{n,l}$ é o valor do espectro de energia. Derivando a equação (5.17) com relação ao fluxo Φ temos o valor da corrente persistente para este sistema:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm \vartheta_s}{|\vartheta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\vartheta_s|}{2} + s\frac{\varsigma_s}{2} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1a_2} \right\}^{-1/2} \quad (5.20)$$

Assim como no modelo de anel 2-D relativístico, no capítulo anterior, tanto o espectro de energia (5.18) como a corrente persistente (5.20) dependem dos parâmetros de controle a_1 , a_2 , e dos números quânticos n e l .

5.2.4 Cálculo dos Espinores de Energia Positiva para Folha Plana de Grafeno

Como as soluções de energia positiva $E > 0$, descrevem a dinâmica dos elétrons da banda de condução, enquanto que $E < 0$ descreve a dinâmica de buracos, neste trabalho vamos estudar apenas o primeiro caso. Vale salientar que as componentes do espinor no

grafeno descrevem as contribuições das sub-redes para a condução, com o spin real das partículas não sendo considerados nessa aproximação.

Para obter os espinores correspondentes à energia positiva da equação (4.14), usando a mudança de variável (5.11), vamos reescrever a equação radial (5.13) como:

$$R_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) = e^{-\frac{\sqrt{2a_2}\rho^2}{2}} (\sqrt{2a_2}\rho^2)^{\frac{|\vartheta_s|}{2}} F_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) , \quad (5.21)$$

onde $F_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) = {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2)$. Substituindo na equação (5.8) para z fixo, com $k = 0$ e $j = l + \frac{1}{2}$ (pois $E > 0$) temos:

$$\eta_s = e^{ij\varphi} R_s(\varrho) = e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} \rho^{|\vartheta_s|} \times {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2) . \quad (5.22)$$

A derivada da função ${}_1F_1$ com relação a ρ é calculada como (ver apêndice A.3):

$$\frac{d}{d\rho} \{ {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2) \} = \frac{(-n)}{|\vartheta_s| + 1} {}_1F_1(-n + 1, |\vartheta_s| + 2, \sqrt{2a_2}\rho^2) \times 2\sqrt{2a_2}\rho . \quad (5.23)$$

A normalização da equação radial (5.22), dada por

$$|A| \int_0^\infty \eta^* \eta \rho d\rho = 1 , \quad (5.24)$$

é obtida como (ver apêndice A.4):

$$|A| = \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma(|\vartheta_s| + n + 1)}{\Gamma(n + 1) [\Gamma(|\vartheta_s| + 1)]^2} \right)^{1/2} , \quad (5.25)$$

de maneira que η_s é definida como

$$\eta_s = N_s \times {}_1F_1(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2) , \quad (5.26)$$

onde

$$N_s = A \cdot e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} \rho^{|\vartheta_s|} . \quad (5.27)$$

A partir da equação (5.26), fazendo as derivadas parciais $\partial_\rho \eta_s$, $\partial_\varphi \eta_s$ e considerando a derivada da hipergeométrica confluyente (5.23) temos:

$$\begin{aligned}\partial_\rho \eta_s = N_s \left(-\sqrt{2a_2\rho} + \frac{|\vartheta_s|}{\rho} \right) \times {}_1F_1 \left(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \\ - N_s \frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{|\vartheta_s| + 1} {}_1F_1 \left(-n + 1, |\vartheta_s| + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right),\end{aligned}$$

$$\partial_\varphi \eta_s = iN_s \left(l + \frac{1}{2} \right) \times {}_1F_1 \left(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right). \quad (5.28)$$

Substituindo as derivadas parciais (5.28) e a equação radial (5.26) em (5.6), obtemos a solução para os espinores de χ :

$$\begin{aligned}\chi = \frac{i}{E} N_s \left\{ \left[2\sqrt{2a_2\rho} - \frac{|\vartheta_s|}{\rho} - \frac{1}{2\rho} + \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} \right] \sigma^1 {}_1F_1 \left(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\} \\ + \frac{i}{E} N_s \left\{ \frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{|\vartheta_s| + 1} \sigma^1 {}_1F_1 \left(-n + 1, |\vartheta_s| + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\} \\ + \frac{1}{E} N_s \left\{ \left[\frac{1}{\rho} \left(l + \frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \right] \sigma^2 {}_1F_1 \left(-n, |\vartheta_s| + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\}. \quad (5.29)\end{aligned}$$

Os biespinores podem ser representados como :

$$\eta(\rho) = \begin{pmatrix} \eta_+(\rho) \\ \eta_-(\rho) \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Com posse das equações (5.26) e (5.29), usando as propriedades das matrizes σ e as representações dos biespinores (5.30), é possível escrever as soluções de energia positiva da equação de Dirac correspondentes às componentes paralelas, e antiparalelas na direção z [51, 52, 53] da banda de condução:

$$\begin{aligned}\psi_+ = f_+ {}_1F_1 \left(-n, |\vartheta_+| + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2\rho} + \frac{(\varsigma_+ - |\vartheta_+| + \sqrt{2a_1})}{\rho} \right] \end{pmatrix} \\ + \frac{if_+}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{|\vartheta_+| + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, |\vartheta_+| + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.31)\end{aligned}$$

para $s = +1$, $\eta_-(\rho) = 0$, e

$$\begin{aligned}
\psi_- = & f_- {}_1F_1(-n, |\vartheta_-| + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2}\rho - \frac{(\varsigma_- + |\vartheta_-| - \sqrt{2a_1})}{\rho} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\
& + \frac{if_-}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2}\rho}{|\vartheta_-| + 1} \right) {}_1F_1(-n + 1, |\vartheta_-| + 2, \sqrt{2a_2}\rho^2) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.32)
\end{aligned}$$

para $s = -1$ e $\eta_+(\rho) = 0$. Nas equações acima o fator $f_s = N_s e^{-iEt}$ é escrito a partir das equações (5.25) e (5.27) como:

$$\begin{aligned}
f_s = & \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma(|\vartheta_s| + n + 1)}{\Gamma(n + 1) [\Gamma(|\vartheta_s| + 1)]^2} \right)^{1/2} \\
& \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\vartheta_s|}{4}} \rho^{|\vartheta_s|}. \quad (5.33)
\end{aligned}$$

5.3 Confinamento no Anel 2-D para a Folha de Grafeno na Presença de Defeito Topológico

Em um sistema real, na rede cristalina de um sólido, verifica-se a ocorrência de alguns defeitos. As vezes de origem química, elétrica ou estrutural, o estudo destes defeitos têm mostrado uma série de aplicações tecnológicas [54], bem como um entendimento a respeito das propriedades de transporte eletrônico, transição de fase e difusão em sistemas da matéria condensada [55]. Dentre estes, vamos destacar o defeito de ordem estrutural, ou topológico, que vem sendo estudado tanto na gravitação como na matéria condensada. Em ambas áreas de estudos, defeitos topológicos são caracterizados através da quebra de simetria do sistema. Entre os vários defeitos inerentes a geometria do sistema, terá destaque neste trabalho o defeito conhecido como desclinação. O que caracteriza este tipo de defeito é o aspecto da estrutura obtida pelo processo “corte e cola” conhecido na literatura como *processo de Voterra* [9].

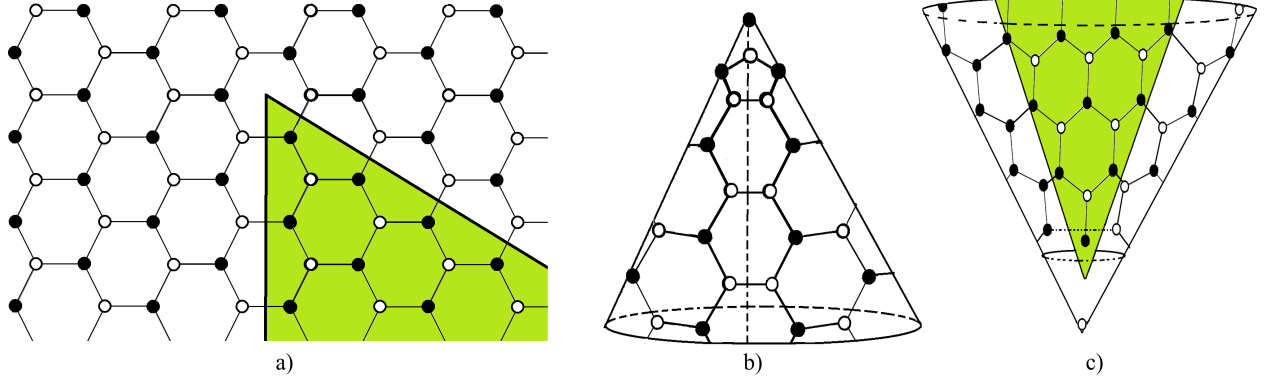


Figura 5.1: *Processo de Volterra*, em: (a) Folha de grafeno plana, com o setor angular λ (em verde). Os átomos pretos representam a sub-rede A e os brancos a sub-rede B; (b) desclinação positiva, (c) desclinação negativa.

Na figura (5.1), o setor verde em (a) é o pedaço que será cortado e removido ou adicionado ao plano. Em ambos casos, o plano adquire um aspecto cônico que vai definir o tipo de defeito. O λ é chamado de ângulo de déficit. Como $\lambda \propto \pi/3$, no caso do grafeno, devido a simetria hexagonal, temos

$$\lambda = \pm \frac{N\pi}{3} \quad (5.34)$$

onde $N \in [0, 6]$ é o número de setores removidos ou adicionados. O sinal “+” representa a adição de um setor, o que caracteriza a desclinação negativa no item (c). O sinal “−” representa a remoção de um setor, o que caracteriza a desclinação positiva no item (b). Para este tipo de defeito, será usada abordagem geométrica de Katanaev e Volovick, onde a métrica aplicada para descrever este defeito em sólidos [56] é dada por:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2, \quad (5.35)$$

onde

$$\alpha = 1 + \frac{\lambda}{2\pi} = 1 \pm \frac{N}{6}. \quad (5.36)$$

Numa folha de grafeno onde há a presença de desclinação, seja positiva com a remoção de um setor angular, seja negativa com a adição de um setor angular, surge uma descontinuidade na rede geométrica, como pode ser vista na figura (5.1): em b) tem-se átomos da sub-rede A ligados entre si; em c) os átomos da sub-rede B numa parte

da “colagem” ligam-se entre si. Em número de setores temos que: $N = 1, 3, 5$ ocorre a descontinuidade na rede; $N = 2, 4$ não ocorre descontinuidade sendo que o valor máximo de setores inseridos ou retirados para que o grafeno com defeito exista, é $N = 5$. Esta descontinuidade se comporta como um “campo” que no trabalho desenvolvido por Furtado, Moraes e Carvalho[56] foi deduzido a fase da holonomia cônica no grafeno, bem como a conexão espinorial conhecida na teoria de espaços curvos, tornando possível a descrição da geometria cônica do grafeno pela métrica (5.35)¹. Partimos desta métrica e sabemos que

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = e_a^\mu e_b^\nu \eta^{ab} dx^\mu dx^\nu \quad (5.37)$$

onde e_a^μ e e_b^ν são os conjuntos de tetradas que relacionam os componentes da base não coordenada $\widehat{e}^a$ no referencial local, onde está o defeito, com o referencial global no espaço-tempo pela relação $\widehat{e}^a = e_a^\mu dx^\mu$. A partir disso é possível escrever a base não coordenada:

$$\widehat{e}^a = e_a^\mu dx^\mu \Rightarrow \begin{cases} \widehat{e}^0 = dt ; \\ \widehat{e}^1 = \cos\varphi d\rho - \alpha \rho \sin\varphi d\varphi ; \\ \widehat{e}^2 = \sin\varphi d\rho + \alpha \rho \cos\varphi d\varphi ; \end{cases} \quad (5.38)$$

de maneira que podemos escrever a matriz do campo de tetradas e_μ^a e sua inversa e_a^μ como:

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\alpha \rho \sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \alpha \rho \cos\varphi \end{pmatrix}, \quad e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & -\frac{\sin\varphi}{\alpha\rho} & \frac{\cos\varphi}{\alpha\rho} \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

Com estas matrizes dadas em (5.39) temos que obter a conexão 1-forma ω_b^a obtidas através da estrutura de Maurer-Cartan $de^a + \omega_b^a \wedge e^b = 0$ (sem torção). Pela simetria do defeito (5.34), há nas conexões 1-forma duas componentes não nulas:

$$\omega_1^2 = -\omega_2^1 = -(\alpha - 1)d\varphi. \quad (5.40)$$

Pela expressão $\Gamma_{\mu b}^a(x) = \omega_b^a dx^\mu$ obtemos a seguinte matriz de conexão de spin:

$$\Gamma_\mu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(\alpha - 1) \\ 0 & (\alpha - 1) & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.41)$$

¹Na verdade é a métrica de um corda cósmica para $z = 0$ adaptada ao contexto do limite contínuo do grafeno.

que está relacionada com a conexão 1-forma. Finalmente, a conexão espinorial que é descrita em termos da conexão de spin pela equação $\Gamma_\mu = -\frac{1}{8}\Gamma_{\mu ab}[\gamma^a, \gamma^b]$ com apenas uma componente não nula é dada por

$$\Gamma_\varphi = -\frac{i}{2}(\alpha - 1)\sigma^3. \quad (5.42)$$

Outro fato interessante na rede hexagonal plana, é que os espinores fazem um caminho através de um circuito fechado em torno do defeito de maneira que os mesmo pulam da sub-rede A para B e vice-versa, mas quando é inserida a desclinação, átomos de uma mesma sub-rede se ligam, fazendo com que o espinores pulem em uma mesma sub-rede. Consequentemente a estrutura eletrônica tem as suas propriedades de transporte eletrônicos não locais afetadas. Para contornar estes problemas, em seu trabalho[57, 58], Bueno, inseriu um campo de gauge não abeliano Ω na equação de Dirac sem massa de maneira a compensar a descontinuidade fictícia da função de onda dos espinores sendo escrita como:

$$\bar{\gamma}^\mu \left(i\nabla_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \Psi = 0, \quad (5.43)$$

onde ∇_μ é a derivada covariante definida de modo

$$\nabla_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \Gamma_\mu, \quad (5.44)$$

onde $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ é a derivada ordinária e Γ_μ a conexão espinorial. O campo Ω é definido [57] como

$$\Omega = \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1), \quad (5.45)$$

com $\pm$ referindo-se aos espinores para cada ponto de Fermi K_- e K_+ .

Usando a conexão espinorial Γ_s obtida em (5.41) na equação (5.42), é obtida, após algumas manipulações, a descrição da equação de Dirac na presença do defeito de desclinação na presença do campo magnético na direção z [57]:

$$\left[i\bar{\gamma}^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\bar{\gamma}^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\alpha - 1}{2\alpha\rho} \right) + i\bar{\gamma}^2 \left(\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - \bar{\gamma}^2 \left(\frac{\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{|q|B\rho}{2} \right) \right] \Psi' = 0, \quad (5.46)$$

onde foi feito o acoplamento mínimo do campo $i\partial_\mu \rightarrow i\partial_\mu - |q|\mathbf{A}_\mu$. Como desejamos investigar o comportamento do sistema diante do fluxo *Aharonov-Bohm*, $\Phi = B.a = B.(\pi\rho^2)$, definido no capítulo 3 para o anel 1-D, reescreveremos a equação acima como:

$$\left[i\bar{\gamma}^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\bar{\gamma}^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\alpha - 1}{2\alpha\rho} \right) + i\bar{\gamma}^2 \left(\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - \bar{\gamma}^2 \left(\frac{\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \right] \Psi' = 0, \quad (5.47)$$

com $\Phi_0 = \frac{|q|}{2\pi}$, o quantum de fluxo magnético.

As matrizes análogas às de Dirac para o referencial local $\bar{\gamma}$ são expressas como $\bar{\gamma} = e_a^\mu \gamma^a$ onde γ^a satisfazem a relação do espaço-tempo de Minkowski $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$, de maneira que [50]:

$$\bar{\gamma} = e_a^\mu \gamma^a = \begin{cases} \bar{\gamma}^0 = \gamma^0; \\ \bar{\gamma}^1 = \gamma^1 \cos \varphi + \gamma^2 \sin \varphi; \\ \bar{\gamma}^2 = -\frac{\gamma^1}{\alpha\rho} \sin \varphi + \frac{\gamma^2}{\alpha\rho} \cos \varphi. \end{cases} \quad (5.48)$$

Para transformar as matrizes $\bar{\gamma}^\mu$ em γ^μ no espaço de Minkowski, será feito procedimento adotado por Villalba[59, 60] onde serão utilizadas as transformações de similaridade:

$$S(\varphi) = e^{-i\frac{\varphi}{2}\sigma^3} \quad \text{ou} \quad S^{-1}(\varphi) = e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma^3}, \quad (5.49)$$

que satisfazem as propriedades

$$S(\varphi)^{-1} S(\varphi)^1 = 1 \quad e \quad S(\varphi)^1 S(\varphi)^{-1} = 1. \quad (5.50)$$

Assim, a relação das matrizes $\bar{\gamma}$ do espaço local, com as matrizes γ do espaço global se tornam:

$$\begin{aligned} S^{-1}(\varphi) \bar{\gamma}^0 S(\varphi) &= \gamma^0; \\ S^{-1}(\varphi) \bar{\gamma}^1 S(\varphi) &= \gamma^1; \\ S^{-1}(\varphi) \bar{\gamma}^2 S(\varphi) &= \gamma^2. \end{aligned} \quad (5.51)$$

A transformação S em (5.48) relaciona a função de onda global com o referencial local Ψ' pela relação $\Psi' = S\Psi$ ou seja:

$$\Psi' = e^{-iEt - i\frac{\varphi}{2}\sigma^3} \begin{pmatrix} \eta \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (5.52)$$

onde, como foi visto anteriormente, $\eta = \eta(\rho, \varphi)$ e $\chi = \chi(\rho, \varphi)$ representam as sub-redes A e B respectivamente.

5.3.1 Espectro de Energia da Quasipartícula na Presença da Desclinação

Multiplicando (5.46) pela esquerda por S e pela direita por S^{-1} e considerando o conjunto de relações em (5.49) e (5.50) assim como as propriedades das matrizes γ em (4.5) e das matrizes α e β em (4.6), obtemos a partir da função de onda (5.52), as equações acopladas para η :

$$E\eta = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right] \chi - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \chi, \quad (5.53)$$

e para χ :

$$E\chi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right] \eta - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \eta, \quad (5.54)$$

onde novamente o sistema só apresenta dependência em ρ e φ . Para investigarmos o confinamento no nosso modelo de acoplamento, basta fazer $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + i \left[\frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} + \sqrt{2a_2\rho} \right] \gamma^0 \hat{e}_\rho$ no hamiltoniano do sistema, de maneira que as duas equações acopladas serão reescritas como:

$$E\eta = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} + \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} + \sqrt{2a_2\rho} \right] \chi - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \chi \quad (5.55)$$

e

$$E\chi = -i\sigma^1 \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} - \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} - \sqrt{2a_2\rho} \right] \eta - i\sigma^2 \left[\frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i\Omega_\varphi}{\rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \eta. \quad (5.56)$$

Para desacoplar estas equações, vamos substituir (5.56) em (5.55) de maneira que desejamos eliminar χ . Nesta substituição serão utilizadas as propriedades das matrizes (2.25), de forma que o espectro de energia será dependente apenas da parte radial, ou seja:

$$\begin{aligned}
E^2 \eta &= -\frac{\partial \eta^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial \rho} + \frac{\eta}{4\rho^2} - \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho^2} \eta + \sqrt{2a_2} \eta + \frac{i\sigma^3}{\alpha\rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + \frac{2a_1 \eta}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\Phi}{\Phi_0} \sigma^3 \eta \\
&+ 4\sqrt{a_1 a_2} \eta - \frac{2i\sqrt{2a_1}}{\alpha\rho^2} \sigma^3 \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - \frac{2i\Omega_\varphi}{\alpha\rho^2} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - \frac{2\sqrt{2a_1}}{\rho^2} \frac{\Phi}{\Phi_0} \sigma^3 \eta + 2a_2 \rho^2 \eta \\
&+ \frac{2\sqrt{2a_1} \Omega_\varphi \sigma^3 \eta}{\rho^2} + 2\sqrt{2a_2} \Omega_\varphi \sigma^3 \eta - \frac{2i\sqrt{2a_2} \sigma^3}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} - 2\sqrt{2a_2} \frac{\Phi}{\Phi_0} \sigma^3 \eta \\
&- \frac{2}{\rho^2} \frac{\Phi}{\Phi_0} \Omega_\varphi \eta - \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \varphi^2} - \frac{\Omega_\varphi}{\rho^2} \sigma^3 \eta + \frac{1}{\rho^2} \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \eta + \frac{2i}{\alpha\rho^2} \frac{\Phi}{\Phi_0} \frac{\partial \eta}{\partial \varphi} + \frac{\Omega_\varphi^2}{\rho^2} \eta. \quad (5.57)
\end{aligned}$$

A solução desta equação depende apenas de ρ , logo para $k = 0$ em (5.8) obtemos:

$$\eta = e^{ij\varphi} \begin{pmatrix} R_+(\rho) \\ R_-(\rho) \end{pmatrix}, \quad (5.58)$$

onde $j = l + \frac{1}{2}$, com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, lembrando que η é autovalor de σ^3 . Substituindo a equação (5.58) em (5.57) para as derivadas parciais ∂_η , $\partial_{\eta\eta}$, ∂_φ , $\partial_{\varphi\varphi}$, usando $\sigma^3 \eta_s = \pm \eta_s = s\eta$, e a notação $R_s(\rho) = (R_+(\rho), R_-(\rho))$ obtemos novamente a equação radial:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\delta_s^2}{\alpha^2 \rho^2} - 2a_2 \rho^2 + \epsilon_s \right] R_s(\rho) = 0 \quad (5.59)$$

com parâmetros δ_s , κ_s e ϵ_s redefinidos como:

$$\begin{cases} \delta_s = \kappa_s + \alpha s \sqrt{2a_1} \\ \kappa_s = \left(l + \frac{1}{2}\right) - \alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha \Omega_\varphi - \alpha \frac{s}{2} \\ \epsilon_s = E^2 - \frac{2s\sqrt{2a_2}}{\alpha} \kappa_s - 2\sqrt{2a_2} - 4\sqrt{a_1 a_2} \end{cases} \quad (5.60)$$

Para resolver a equação (5.59) fazemos primeiramente a mudança de variável²

$$\xi = \sqrt{2a_2} \rho^2, \quad (5.61)$$

de maneira que reparametrizando (5.59) chegamos no seguinte aspecto:

$$\left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d}{d\xi} - \frac{\delta_s^2}{4\alpha^2 \xi} - \frac{\xi}{4} + \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} \right] R_s(\xi) = 0. \quad (5.62)$$

Para o modelo desenvolvido aqui, a solução pra equação a cima deve ser regular na origem e finita em qualquer lugar, ou seja, $R_s \rightarrow 0$ quando $\rho \rightarrow \infty$. A função que satisfaz essas condições tem a forma:

$$R_s(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|\delta_s|}{2\alpha}} F_s(\xi). \quad (5.63)$$

²Embora seja a mesma mudança de variável do caso plano, vamos utilizar a letra ξ para caracterizar o estudo para o grafeno com defeito.

Substituindo a equação anterior em (5.62) obtemos:

$$\xi \frac{d^2 F_s}{d\xi^2} + \left[\frac{|\delta|}{\alpha} + 1 - \xi \right] \frac{dF_s}{d\xi} + \left[\frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} - \frac{|\delta_s|}{2\alpha} - \frac{1}{2} \right] F_s(\xi) = 0, \quad (5.64)$$

que corresponde a equação da hipergeométrica confluyente (ver Apêndice A.1), com solução:

$$F_s = {}_1F_1(a, b; z) = {}_1F_1 \left(\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}}, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \xi \right). \quad (5.65)$$

Agora para obtermos uma solução finita em qualquer lugar, vamos impor a condição onde a solução de série hipergeométrica torne-se um polinômio de grau n , (Ver Apêndice A.2) que é:

$$\frac{|\delta_s|}{2\alpha} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon_s}{4\sqrt{2a_2}} = -n. \quad (5.66)$$

A partir desta equação, substituindo os parâmetros (5.60), obtemos o espectro de energia, para a quasipartícula confinada no anel 2-D sobre um cone de grafeno, obtido via desclinação:

$$E_{n,l}^2 = 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\delta_s|}{2\alpha} + s \frac{\kappa_s}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2}, \quad (5.67)$$

podendo ser reescrito ainda, de maneira explícita, como:

$$E_{n,l}^2 = 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{\left| \left(l + \frac{1}{2} \right) - \alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha \Omega_\varphi - \alpha \frac{s}{2} + \alpha s \sqrt{2a_1} \right|}{2\alpha} \right] + 4\sqrt{2a_2} \left[s \frac{\left(\left(l + \frac{1}{2} \right) - \alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha \Omega_\varphi - \alpha \frac{s}{2} \right)}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2}. \quad (5.68)$$

Na equação acima, $s = +1$ corresponde a sub-rede A e $s = -1$ corresponde a sub-rede B. Observe que no espectro, além da dependência dos números quânticos n e l , temos as dependências dos parâmetros a_1 e a_2 , bem como a contribuição do campo não abeliano responsável pela correção da descontinuidade fictícia da função de onda dos espinores, devido a presença do defeito. Fazendo $\alpha = 1$, implica que $\Omega_\varphi = 0$: os parâmetros δ_s , κ_s e ϵ_s , serão ϑ_s , ς_s e ε_s respectivamente. Assim o espectro (5.68) recai na equação (5.17), recuperando assim, o caso da folha plana de grafeno sem defeito topológico.

5.3.2 Cálculo de Correntes Persistentes na Folha de Grafeno com Desclinação

O cálculo da corrente persistente, como foi visto anteriormente, é definido por:

$$I = - \sum_{n,l} \frac{\partial E_{n,l}}{\partial \Phi}, \quad (5.69)$$

onde $E_{n,l}$ é o valor do espectro de energia. Derivando a equação (5.67) com relação ao fluxo Φ , o valor da corrente persistente na presença da desclinação é dado por:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm \delta_s}{|\delta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|\delta_s|}{2\alpha} + s \frac{\kappa_s}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2} \right\}^{-1/2}, \quad (5.70)$$

que reescrevendo em termo dos parâmetros (5.60) temos explicitamente:

$$I = \frac{|q|}{2\pi} \sum_{n,l} \sqrt{2a_2} \left(\frac{\pm \delta_s}{|\delta_s|} + 1 \right) \times \left\{ 4\sqrt{2a_2} \left[n + \frac{|(l+\frac{1}{2})-\alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha \Omega_\varphi - \alpha \frac{s}{2} + \alpha s \sqrt{2a_1}|}{2\alpha} \right] + 4\sqrt{2a_2} \left[s \frac{((l+1/2)-\alpha \frac{\Phi}{\Phi_0} + \alpha \Omega_\varphi - \alpha \frac{s}{2} + \alpha s \sqrt{2a_1})}{2\alpha} + 1 \right] + 4\sqrt{a_1 a_2} \right\}^{-1/2}, \quad (5.71)$$

onde obtemos a corrente persistente (5.70) em função dos parâmetros de controle a_1 , a_2 e dos números quânticos n e l . Além disso, observamos também o surgimento do termo de correção Ω_φ , onde se fizermos $\alpha = 1$, recuperamos o caso da corrente persistente para a folha plana de grafeno (5.20), ou seja, sem defeito topológico.

5.3.3 Cálculo dos Espinores de Energia Positiva na Folha de Grafeno com Desclinação

Como vimos anteriormente, as soluções de energia positiva $E > 0$, descrevem a dinâmica dos elétrons para a banda de condução, enquanto que $E < 0$ descreve a dinâmica de buracos, na banda de valência. No nosso trabalho vamos abordar apenas o primeiro caso. Também como foi falado anteriormente, as componentes do espinor no grafeno descrevem a contribuição das sub-redes para a condução, com o spin das partículas não sendo considerados nessa aproximação.

Para obtermos os espinores correspondentes a energia positiva da equação (5.52), vamos utilizar a mudança de variável (5.61) e vamos reescrever a equação radial (5.63) como:

$$R_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) = e^{\frac{-\sqrt{2a_2}\rho^2}{2}} (\sqrt{2a_2}\rho^2)^{\frac{|\delta_s|}{2\alpha}} F_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) \quad (5.72)$$

onde $F_s(\sqrt{2a_2}\rho^2) = {}_1F_1\left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2\right)$. Para $k = 0$ e $j = l + \frac{1}{2}$ na equação (5.8), temos:

$$\eta_s = e^{i(l+\frac{1}{2})\varphi} R_s(\xi) = e^{i(l+\frac{1}{2})\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\delta_s|}{4\alpha}} \rho^{\frac{|\delta_s|}{\alpha}} \times {}_1F_1\left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2\right). \quad (5.73)$$

A derivada da função ${}_1F_1$, com relação a ρ , é calculada como (ver apêndice A.3):

$$\frac{d}{d\rho} \left\{ {}_1F_1\left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2\right) \right\} = \frac{(-n)2\sqrt{2a_2}\rho}{\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1} {}_1F_1\left(-n + 1, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2}\rho^2\right). \quad (5.74)$$

A normalização da equação radial, (5.73) é dada da seguinte maneira:

$$|B| \int_0^\infty \eta^* \eta \rho d\rho = 1, \quad (5.75)$$

é obtida como (ver Apêndice A.4)³:

$$|B| = \left(\frac{\sqrt{8a_2} \Gamma(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + n + 1)}{\Gamma(n + 1) \left[\Gamma(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1) \right]^2} \right)^{1/2}, \quad (5.76)$$

de modo que

$$\eta_s = N_s \times {}_1F_1\left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2\right), \quad (5.77)$$

onde

$$N_s = B.e^{i(l+\frac{1}{2})\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\delta_s|}{4\alpha}} \rho^{\frac{|\delta_s|}{\alpha}}. \quad (5.78)$$

A partir da equação (5.77), fazendo as derivadas parciais $\partial_\rho \eta_s$, $\partial_\varphi \eta_s$, e usando a equação (5.74) temos:

³O proceimento matemático é o mesmo do caso da folha plana, com diferença no parâmetro usado que desta vez é δ_s .

$$\begin{aligned}
\partial_\rho \eta_s &= N_s \left(-\sqrt{2a_2\rho} + \frac{|\delta_s|}{\alpha\rho} \right) \times {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \\
&\quad - N_s \frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1} {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right), \\
\partial_\varphi \eta_s &= iN_s \left(l + \frac{1}{2} \right) \times {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right). \tag{5.79}
\end{aligned}$$

Substituindo as derivadas parciais (5.79), e a equação radial (5.77) na equação (5.56), obtemos a solução para os espinores de χ como:

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{i}{E} N_s \left\{ \left[2\sqrt{2a_2\rho} - \frac{|\delta_s|}{\alpha\rho} - \frac{1}{2\rho} + \frac{\sqrt{2a_1}}{\rho} \right] \sigma^1 {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\} \\
&\quad + \frac{i}{E} N_s \left\{ \frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1} \sigma^1 {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{E} N_s \left\{ \left[\frac{1}{\rho} \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\varphi - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \right] \sigma^2 {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \right\}. \tag{5.80}
\end{aligned}$$

Os biespinores podem ser representados novamente como

$$\eta(\rho) = \begin{pmatrix} \eta_+(\rho) \\ \eta_-(\rho) \end{pmatrix}. \tag{5.81}$$

Com posse das equações (5.77) e (5.80), usando as propriedades das matrizes σ e as representações dos biespinores (5.81), é possível escrever as soluções de energia positiva da equação de Dirac correspondentes às componentes paralelas, e antiparalelas na direção z [51, 52, 53, 61] da banda de condução, na presença da desclinação como:

$$\begin{aligned}
\psi_+ &= f_+ {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2\rho} + \frac{(\kappa_+ - |\delta_+| + \alpha\sqrt{2a_1})}{\alpha\rho} \right] \end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{if_+}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2\rho}}{\frac{|\delta_+|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_+|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2\rho^2} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{5.82}
\end{aligned}$$

para $s = +1$ e $\eta_-(\rho) = 0$, e

$$\begin{aligned} \psi_- = & f_- {}_1F_1 \left(-n, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1, \sqrt{2a_2}\rho^2 \right) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{i}{E} \left[2\sqrt{2a_2}\rho - \frac{(\kappa_- + |\delta_-| - \alpha\sqrt{2a_1})}{\alpha\rho} \right] \\ 0 \end{pmatrix} \\ & + \frac{if_-}{E} \left(\frac{2n\sqrt{2a_2}\rho}{\frac{|\delta_-|}{\alpha} + 1} \right) {}_1F_1 \left(-n + 1, \frac{|\delta_-|}{\alpha} + 2, \sqrt{2a_2}\rho^2 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.83)$$

para $s = -1$ e $\eta_+(\rho) = 0$. O fator $f_s = N_s e^{-iEt}$ é escrito, usando (5.78) e (5.76), neste caso como:

$$\begin{aligned} f_s = & \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma\left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + n + 1\right)}{\Gamma(n + 1) \left[\Gamma\left(\frac{|\delta_s|}{\alpha} + 1\right) \right]^2} \right)^{1/2} \\ & \times e^{-iEt} e^{i(l+1/2)\varphi} e^{-\sqrt{\frac{a_2}{2}}\rho^2} (2a_2)^{\frac{|\delta_s|}{4\alpha}} \rho^{\frac{|\delta_s|}{\alpha}} \end{aligned} \quad (5.84)$$

Mais uma vez, se fizermos $\alpha = 1$, recuperamos a identidade dos espinores no caso da folha plana de grafeno, mostrando, portanto, que estes resultados dão consistência ao nosso modelo de confinamento.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação, estudamos as propriedades eletrônicas do grafeno no limite de baixas energias, onde os elétrons, que são os portadores de carga nesse material, apresentam uma relação de dispersão linear para o espectro de energia. Diante deste comportamento, foi verificado que os elétrons neste material se assemelham a férmions de Dirac podendo ser, portanto, descritos pela equação de Dirac sem massa em (2+1) dimensões.

Estudamos também a estrutura confinante do anel quântico 1-D, bem como sua aplicação no estudo do efeito *Aharonov-Bohm* e o surgimento das denominadas correntes persistentes. Posteriormente vimos o modelo de anel quântico 2-D desenvolvido por Tan-Inkson que mostrou-se como uma generalização dos tipos de potenciais confinantes como antipontos quânticos, pontos quânticos, anel 1-D e o fio esticado 2-D através da manipulação dos parâmetros de controle a_1 e a_2 próprios deste modelo.

Na sequência estudamos o modelo de anel 2-D para uma partícula relativística de spin 1/2 baseado no acoplamento Bakke-Furtado. Este se mostrou como um modelo de aplicação em sistemas da matéria condensada semelhantes aos sistemas ultrarelativísticos, nos quais a relação de dispersão de energia é linear. Foram obtidos tanto o espectro de energia como a corrente persistente escritos em termos dos parâmetros de controle a_1 e a_2 . Foi mostrado que no limite não relativístico são recuperados o espectro de energia e a corrente persistente prevista pelo modelo Tan-Inkson. Mostramos que o modelo proposto por Bakke-Furtado é uma possível generalização da estrutura anelar 2-D de Tan-Inkson para sistemas quânticos relativísticos.

Seguindo a linha do que foi exposto, finalmente propomos um novo modelo fenomenológico de anel 2-D a partir de um novo acoplamento para a equação de Dirac (2+1) dimensões

no grafeno sem massa, inspirado no acoplamento Bakke-Furtado para partículas relativísticas de spin $1/2$ e no oscilador de *Dirac*. Usando este novo acoplamento estudamos o confinamento de uma quasipartícula num anel quântico 2-D, no grafeno na presença de um campo magnético e de um fluxo *Aharonov-Bohm* perpendicular ao plano do anel. Este estudo, se mostrou como uma aplicação eficaz em duas situações específicas: o confinamento da quasipartícula numa folha plana de grafeno e o confinamento de uma quasipartícula numa folha de grafeno com defeito topológico do tipo desclinação. Neste segundo caso, trabalhamos com equação de Dirac (2+1) sem massa acrescentada com a conexão espinorial e um campo de gauge não abeliano, responsável pela correção da descontinuidade fictícia da função de onda dos espinores.

Nosso novo modelo de anel 2-D nos permitiu obter o espectro de energia, a corrente persistente e os espinores de energia positiva, referente à banda de condução do grafeno, em termos dos parâmetros a_1 e a_2 para as duas situações citadas anteriormente. Na segunda situação, observamos que o parâmetro α , que indentifica a presença do defeito topológico, é percebido pelo espectro de energia, pela corrente persistente e pelos os espinores referentes a energia positiva, logo o defeito tem influência nestes entes calculados. Assim mostramos que, nosso modelo é de certa forma uma possível generalização para sistemas confinantes no grafeno, onde dependendo dos valores dos parâmetros a_1 e a_2 , é possível investigar a ocorrência de pontos quânticos e anti-pontos quânticos, semelhante ao modelo de Tan-Inkson. Mostramos que o parâmetro α , que indentifica a presença do defeito topológico nos resultados, quando feito a igualdade, $\alpha = 1$, recai no caso da folha plana de grafeno, ou seja, atendendo nossas expectativas.

Através deste novo modelo de anel quântico 2-D proposto neste trabalho, temos a possibilidade de investigar o confinamento em folhas de grafenos sujeitas a outros tipos de defeitos topológicos como deslocamentos ou distorção. Também podemos fazer a aplicação deste novo modelo em outros materiais além do grafeno, que também são cristais bidimensionais estáveis. A condição única e suficiente para a aplicabilidade de nossa proposta é que estes sistemas possam ser descritos pela teoria de Dirac para Férmions, ou seja, sistemas ultrarelativísticos de quasipartículas.

Apêndice A

A Função Hipergeométrica Confluente

A.1 Solução da Função Hipergeométrica

A equação diferencial escrita na forma:

$$z \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + (b - z) \frac{dF(z)}{dz} - aF(z) = 0 \quad (\text{A.1})$$

com singularidade $z = 0$ e uma singularidade irregular $z \rightarrow \infty$ é conhecida na literatura como Hipergeométrica Confluente ou *Equação de Kummer*, [62, 63]. A solução desta equação é dado pela série:

$$F(z) = {}_1F_1(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)x^2}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.2})$$

que pode ser escrita de maneira mais compacta como:

$${}_1F_1(a, b; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (\text{A.3})$$

onde $(a)_n$ e $(b)_n$ são os símbolos de Pochhman, que são definidos como:

$$(a)_n = \frac{(a+n-1)!}{(a-1)!} \quad (a)_0 = 1 \quad (\text{A.4})$$

A série (A.3) é convergente para qualquer z finito. O parâmetro a é arbitrário, enquanto o parâmetro $b \in \mathbb{Z}_+$. Caso a seja um número inteiro negativo ou zero, a série se reduz para um polinômio de grau $|a|$.

A.2 Limites Assintóticos da Função Hipergeométrica

A representação integral da Equação de Kummer:

$${}_1F_1(a, b; z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt \quad (\text{A.5})$$

fazendo a mudança de variável $u = -tz$ obtemos:

$${}_1F_1(a, b; z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} (I + II) \quad (\text{A.6})$$

onde

$$I = \int_0^\infty e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{b-a-1} du \quad e \quad II = \int_\infty^{-z} e^{-u} u^{a-1} \left(1 + \frac{u}{z}\right)^{b-a-1} du \quad (\text{A.7})$$

Quando $|z| \rightarrow \infty$ temos

$$I \approx \int_0^\infty e^{-u} u^{a-1} du = \Gamma(a) \quad e \quad II \approx \Gamma(b-a) (-e)^z z^{a-b+1} \quad (\text{A.8})$$

Onde $\Gamma(a)$ é a definição da função Gamma. Usando (A.7) e (A.8) na equação (A.6) obtemos:

$${}_1F_1(a, b; z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \quad (\text{A.9})$$

Nesta equação como para $b > a$ o primeiro termo domina sobre o segundo termo da equação a cima, ficando, portanto:

$${}_1F_1(a, b; z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \quad (\text{A.10})$$

Na equação (A.10) só se torna nula no limite assintótico somente quando $\Gamma(a) \rightarrow \infty$, por definição isso só ocorre $\Gamma(-n) = \pm\infty$. Assim o parâmetro a desta função deve ser zero ou um número inteiro negativo. De tal forma que a equação hipergeométrica se torna um polinômio.

A.3 Derivada da Função Hipergeométrica Confluyente

A seguinte relação de diferenciação pra esta função será util:

$$\frac{d^n}{dz^n} \{ {}_1F_1(a, b; z) \} = \frac{a_n}{b_n} {}_1F_1(a+n, b+n; z) \quad (\text{A.11})$$

com n sendo a ordem da derivada.

A.4 Integração Envolvendo a Hiper Geométrica Conflunete

A integral do tipo:

$$J_\nu = \int_0^\infty e^{-kz} z^{\nu-1} [{}_1F_1(-n', \gamma; kz)]^2 dz \quad (\text{A.12})$$

será útil no calculo da normalização da equação radial dos problemas expostos neste trabalho. Esse integral é calculada [64] como uma série dado por:

$$J_\nu = \frac{\Gamma(\nu)n'!(\gamma-1)!}{k^\nu(\gamma+n')!} \times \left\{ 1 + \sum_{s=0}^{n'-1} \frac{n'(n'-1)\dots(n'-s)(\gamma-\nu-s-1)(\gamma-\nu-s)\dots(\gamma-\nu+s)}{[(s+1)!]^2 \gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+s)} \right\} \quad (\text{A.13})$$

A.4.1 A Normalização da Função de Onda Radial

Vamos normalizar a a equação (5.22) usando (A.12) e (A.13). Fazendo a transformação de variável $z = \sqrt{2a_2}\rho^2$ temos:

$$\frac{|A|^2}{2(2a_2)^{\frac{1}{2}}} \int_0^\infty e^{-z} z^{|\vartheta_s|} [{}_1F_1(-n', |\vartheta_s| + 1; \sqrt{2a_2}\rho^2)]^2 dz = 1 \quad (\text{A.14})$$

comparando com (A.12) temos a relação de parâmetros: $\gamma = \nu = |\vartheta_s| + 1$, $n' = n$ e $k = 1$.

Para estes valores a somatória em (A.13) vai a zero, restando apenas:

$$\frac{|A|^2}{2(2a_2)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Gamma(|\vartheta_s| + 1)n!(|\vartheta_s|)!}{(|\vartheta_s| + n + 1)!} \right) = 1 \quad (\text{A.15})$$

contudo da propriedade da função gama : $\Gamma(N + 1) = N!$ reescrevemos a constante de normalização como:

$$|A| = \left(\frac{\sqrt{8a_2}\Gamma(|\vartheta_s| + n + 1)}{\Gamma(n + 1) [\Gamma(|\vartheta_s| + 1)]^2} \right)^{1/2} \quad (\text{A.16})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Geim, A. K. e Novoselov, K. S., *The rise of graphene*, Nature materials, 6, 183-191 (2007).
- [2] Mermin, N. D. *Crystalline order in two dimensions*. Phys. Rev. 176, 250 - 254 (1968).
- [3] Katsnelson, M.I., Novoselov, K. S. e Geim, A. K., *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*. Nature Physics., 2, 620-625 (2006).
- [4] Young, A. F., e Kim, P., *Quantum interference e Klein tunnelling in graphene heterojunctions*, Nature Physics, 5, 222-226 (2009).
- [5] Zhang, Y., Tan, Y., Stormer, H. L. e Kim, P., *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*. Nature, 438, 201-204 (2005)
- [6] Bakke, K. e Furtado, C. *On the confinement of Dirac particle to a two-dimensional ring* Phys. Lett. A: 376, 1269-1273, (2012).
- [7] Aharonov, Y. e Bohm, D., *Significance of Electromagnetic Potential in Quantum Mechanics*, Phys. Rev. 115, 485-491 (1959).
- [8] Tan, W-C., e Inkson, J.C., *Electron States in a Two-Dimensional Ring- An Exactly Soluble Model*, Semicond. Sci. Technol. 11(1996) 1635-1641.
- [9] Puntingan, R. A. e Volterra, Soleng, H. H. *Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects* disponível em arXiv:gr-qc/9604057v2 15 Feb 1997.
- [10] Lambin, P. e Fink, J., *Electronic states of carbon materials*, Encyclopedia of Condensed Matter Physics, 1, 142-151 (Elsevier Science, 2005).

- [11] Retiradas da web na ordem de aparição no texto: Figura 2.1: Via animação flash em: <http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/essentialchemistry/flash/hybrv18.swf>
Figura 2.2: http://commons.wikimedia.org/wiki/Category:Image_sources.
- [12] Class for Physics, Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2010 Graphene. *The Royal Swedish Academy of Sciences* STOCKHOLM, (2010).
- [13] Morozov, S. V., Novoselov, K. S., Katsnelson, M. I., Schedin, F., Elias, D. C., Jaszczak, J. A. e Geim, A. K., *Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer*, Physical Review Letters, 100, 016602-016605 (2008).
- [14] Lee, C., Wei, X. D., Kysar J. W. e Hone, J., *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*, Science, 321,385 (2008).
- [15] Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao F. e Lau, C. N., *Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene*, Nano Letters, 8, 902-907 (2008).
- [16] Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, U.M., Novoselov, K.S., Booth, T.J., Stauber, T., Peres, N.M.R. e Geim, A.K., *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*, Science, 320, 1308 (2008).
- [17] Evans, J.W., Thiel, P.A. e Bartelt, M.C., *Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds*. Sur. Sci. Rep. 61, 1-128 (2006).
- [18] Novoselov, K. S. et al. *Electric field effect in atomically thin carbon films*. Science 306, 666-669 (2004).
- [19] Novoselov, K. S. et al. *Two-dimensional atomic crystals*. Proc. Natl Acad. Sci. USA 102, 10451-10453 (2005).
- [20] Giesbers, A. J. M., Zeitler, U., Katsnelson, M.I., Ponomarenko, L.A., Mohiuddin, T.M.G. e MaanPhys, J.C., *Quantum-Hall Activation Gaps in Graphene*, Rev. Lett., 99, 206803 (2007)
- [21] Schedin, F., Geim, A. K., Morozov, S. V., Hill, E. W., Blake, P., Katsnelson, M. I. e Novoselov, K. S., *Detection of Individual Gas Molecules Adsorbed on Graphene*, Nat. Mater., 6, 652-655 (2007).

- [22] Liang,X., Fu, Z. e Chou, S., *Graphene Transistors Fabricated via Transfer- Printing In Device Active-Areas on Large Wafer*, Nano Letters, 7, 3840- 3844 (2007).
- [23] Lemme, M. C., Echtermeyer, T.J., Baus, M., Szafranek, B.N., Bolten, J.,Schmidt, M.,Wahlbrink,T. e Kurz, H., *Mobility in Graphene Double Gate Field Effect Transistors*, *Solid State Electronics*, 52, 514-518 (2008).
- [24] Blake,P., Brimicombe, P. D., Nair, R. R., Booth, T. J., Jiang, D., Schedin, F., Ponomarenko, L. A., Morozov, S. V., Gleeson, H. F., Hill,E. W., Geim, A. K. e Novoselov, K. S., *Graphene-Based Liquid Crystal Device* Nano Lett., 8, 1704-1708 (2008).
- [25] Wallace,P. R., *The band theory of graphite*, Phys. Rev., 71, 622-634 (1947).
- [26] Garcia, J.C.; Justo, J.F.; Machado, W.V.M.; Assali,L.V.C *Physc. Rev. B* 2009, 80, 125421.
- [27] Kittel,C. *Introduction to Solid State Physics*(Wilwy, New York,1976).
- [28] Ashcroft,N.W. e Mermin, N.D.,*Solid state physics* (Holt, Rhinehart and Winston, New York, 1976).
- [29] Guinea, F., e Vozmediano, M., *The Electronic Spectrum of Fullerenes from the Dirac Equation*, Nuclear Physics B, 406, 771-794 (1993).
- [30] Castro Neto,A., Guinea, F., Peres, N., Novoselov, K., e Geim, A., *The electronic properties of graphene*. Rev. Mod. Phys. 81, 109(2009).
- [31] Gierz,I., Riedl C., Starke, U., Ast, C. R. e Kern, K., *Atomic hole doping of graphene*. Nano Lett., 8 (2008) 4603
- [32] Bena, Cristina e Montambaux, Gilles,*Remarks on the tight-binding model of graphene*, New J. Phys, 11, 095003(2009)
- [33] Viefers,S., Koskinen, P., Singha Deo, P. e Manninem, M.,*Quantum rings for beginners: Energy spectra and persistent currents*, Phys. E, 21, 1-35,(2004).
- [34] Halonen, V.,Pietiläinen, P. e Chakraborty, T., *Optical-absorption spectra of quantum dots and rings with a repulsive scattering centre*, Europhys. Lett., 33(5),377-382,(1996).

- [35] Chambers, R. G.: *Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux*. Phys. Rev. Lett., 5(1):3-5, 1960.
- [36] Tonomura, A., Osakabe, N., Matsuda, T., Kawasaki, T., Endo, J., Yano, S. e Yamada, H.: *Evidence for Aharonov-Bohm Effect with Magnetic Field Completely Shielded From Electron Wave*. Phys. Rev. Lett., 56:792-795, Feb 1986.
- [37] Planelles, J., Climente, J.I. e Movilla, J.L., *Aharonov-Bohm for pedestrian* preprint disponível em arXiv, cond-mat/0506691v1 [cond-mat.mes-hall] 27 Jun 2005.
- [38] Peleg, Yoav, Pnini, Reuven e Zaarur, Elyahu, *Schaum's Outline Quantum Mechanics* (The McGraw - Hill Companies, 1998).
- [39] Büttiker, M., Imry, I. e Landauer, R., *Josephson behavior in small normal one-dimensional rings*. Phys. Lett. A, 96:365-367, 1983.
- [40] Bleszynski-Jayich, A. C., Shanks, W. E., Peaudecerf, B., Ginossar, E., von Oppen, F., Glazman, L. e Harris, J. G. E., *Persistent Currents in Normal Metal Rings*. Science 326 (5950): 272-275, 2009.
- [41] Bluhm, H., Koshnick, N., Bert, J., Huber, M. e Moler, K., *Persistent Currents in Normal Metal Rings*. Phys. Rev. Lett. 102, (13): 136802, 2009.
- [42] Byers, N. e Yang, C.N., *Theoretical Considerations Concerning Quantized Magnetic Flux in Superconducting Cylinders*, Phys. Rev. Lett. 7, 46, 1961.
- [43] Imry, Yoseph, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, Inc., New York (1997).
- [44] Xu, Ju, Moxom, J., Overburry, S.H. e White, C.W. *Quantum Antidot Formation and Correlation to Optical Shift of Gold Nanoparticles Embedded in MgO* Phys. Rev. Lett. 88, 17, (2009).
- [45] Ekimov, A. I. e Onushchenko, A. A., *Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals* JETP Lett. 34: 345-349, (1981).
- [46] Moshinsky, M., e Szczepaniak, *The Dirac oscillator*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 22, 817-819 (1989).

- [47] A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado e A. Luis, Nonrelativistic limit in the 2+1 Dirac oscillator: A Ramsey-interferometry effect, *Phys. Review A*, 77, 033832-033840 (2008)
- [48] M. H. Pacheco, R. R. Landim e C. A. S. Almeida, One-dimensional Dirac oscillator in a thermal bath, *Phys. Lett. A*, 311, 93 - 96 (2003).
- [49] V. M. Villalba e R. Pino, Energy spectrum of the ground state of a twodimensional relativistic hydrogen atom in the presence of a constant magnetic field, *Mod. Phys. Letter B*, 17, 1331-1334 (2003).
- [50] Schlunther, Paul, Wietschorke, Karl-Heinz e Greiner Walter, *The Dirac equation in orthogonal coordinate systems: I. The local representation* *J. Phys. A: Math. Gen.* 16(1983).
- [51] Greiner, W., *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equation*, 3^a Ed., Springer, Berlin,(2000).
- [52] Foldy, Leslie L. e Wouthusent, Siegfried A., *On the Dirac Theory os Spin 1/2 Particles ans Its Non-Relativistic Limit* *Phys. Rev.* 78, 29(1950).
- [53] Bakke, K. *Fases Geométricas, Quantização de Landau e Computação Quântica Holonômia para Partículas Neutras na Presença de Defeitos Topológicos* 2009. 173 f. Tese (Doutorado em Física)- Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2009.
- [54] Lahiri, J., Lin, Y., Bozkurt, P., Oleynik, I. I. , e Batzill, M., *An extended defect in graphene as a metallic wire* *Nature Nanotechnology*, 5, 326 - 329 (2010).
- [55] Hyde, S., Andersson, S., Blum, Z., Landg, T., Lidin, S. e Ninham, B. W., *The Language of shape the role of curvature in condensed matter physics, Chemistry and Biology* (Elsevier Science, 1997).
- [56] Furtado, C., Moraes, F. e Carvalho, A. M. de M., *Geometric phase in graphite cones*, *Phys. Lett. A*, 372, 5368 (2008).
- [57] Bueno, M. J., Furtado, C. e Carvalho, A. M. de M., *Landau levels in graphene layers with topological defects*, *Eur. phys. J. B* 85:53 (2012).

- [58] BUENO, M.J. *Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos* 2011. 84 f. Tese (Doutorado em Física) -Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2011.
- [59] Villalba., V.M., *Exact solution of the two-dimensional Dirac oscillator*, Phys. Rev. A: 49, 586 (1994).
- [60] Villalba, V. M. e Maggiolo, Rinón A., *Energy spectrum of a 2D Dirac electron in the presence of a constant magnetic field*, Eur. Phys. J. B, 22, 31-35 (2001).
- [61] Furtado, C e Moraes, F., *Landau levels in the presence of a screw dislocation*, Europhys. Lett., 45(3),279-282 (1999).
- [62] Abramowitz, Milton e A.Stegun, Irene,*Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, capítulo 13,pág. 504,Dover Publications Inc., New York, 1964.
- [63] Arfken, G.,*Mathematical Methods for physicists*, capítulo 13, pag 753, Academic Press, Inc., 3ª Ed., 1985.
- [64] Landau, L. D. e E. M. Lifshitz: *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, vol. 3, 3ª Ed.,Pergamon Press, 1977.