



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO - UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA - CCET
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - DEFIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

**ESTUDO SOBRE OS EFEITOS DA MASSA
EFETIVA ANISOTRÓPICA NAS
PROPRIEDADES ELETRÔNICAS,
MAGNETIZAÇÃO E CORRENTE PERSISTENTE
EM ANEL QUÂNTICO SEMICONDUTOR COM
GEOMETRIA CÔNICA**

FRANCISCO AUGUSTO GONÇALVES DE LIRA

SÃO LUÍS - MA

2021

FRANCISCO AUGUSTO GONÇALVES DE LIRA

**ESTUDO SOBRE OS EFEITOS DA MASSA
EFETIVA ANISOTRÓPICA NAS
PROPRIEDADES ELETRÔNICAS,
MAGNETIZAÇÃO E CORRENTE PERSISTENTE
EM ANEL QUÂNTICO SEMICONDUTOR COM
GEOMETRIA CÔNICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito para a obtenção do grau de **Mestre em Física**.

Área de Concentração: Mecânica Quântica Relativística e Sistemas Mesoscópicos.

Linha de Pesquisa: Física Mesoscópica: Anéis, Fios e Pontos Quânticos.

Orientador: Prof. Dr. Edilberto Oliveira Silva.

SÃO LUÍS - MA

2021

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

de Lira, Francisco Augusto Gonçalves.

ESTUDO SOBRE OS EFEITOS DA MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA
NAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS, MAGNETIZAÇÃO E CORRENTE
PERSISTENTE EM ANEL QUÂNTICO SEMICONDUTOR COM GEOMETRIA
CÔNICA / Francisco Augusto Gonçalves de Lira. - 2021.
119 p.

Orientador(a): Edilberto Oliveira Silva.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-graduação em
Física/ccet, Universidade Federal do Maranhão, São Luís,
2021.

1. Anéis Quânticos. 2. Geometria Cônica. 3. Massa
Efetiva Anisotrópica. I. Silva, Edilberto Oliveira. II.
Título.

FRANCISCO AUGUSTO GONÇALVES DE LIRA

**ESTUDO SOBRE OS EFEITOS DA MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA
NAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS, MAGNETIZAÇÃO E
CORRENTE PERSISTENTE EM ANEL QUÂNTICO SEMICONDUTOR
COM GEOMETRIA CÔNICA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito para a obtenção do grau de **Mestre em Física**.

Esta **DISSERTAÇÃO** foi aprovada, em sua forma final, no dia 05 de agosto de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edilberto Oliveira Silva (Orientador)

Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Diego Paiva Pires

Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Humberto Belich Junior

Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Bertúlio de Lima Bernardo

Universidade Federal da Paraíba

SÃO LUÍS — MA

2021

À minha mãe e ao meu pai.

AGRADECIMENTOS

Chegando a este estágio do mestrado, é impossível dizer que a pandemia da Covid-19 não teve influência relevante sobre o texto que imaginava escrever aqui quando comecei essa jornada. A necessidade do isolamento social consequentemente suprimiu o nível de interação presencial entre colegas de curso e professores, tão importante para discussões que auxiliavam bastante no desenvolvimento de nossos projetos e, portanto, reduziu o número de colegas que gostaria de agradecer aqui explicitamente.

Primeiramente, gostaria de agradecer a todos os meus colegas de mestrado, em especial, àqueles que compartilharam constantemente a sala de alunos comigo durante o primeiro semestre: Gabriel, Wellington e Micael. Com a ajuda deles, tudo parecia ser menos difícil.

Em segundo lugar, gostaria de agradecer a todo o corpo docente e à secretaria do PPGF pelos auxílios, esclarecimentos, lições de vida e conhecimento compartilhado através das disciplinas e tópicos. Em especial, agradeço aos professores Manoel, Casana, Marco e à secretária Lucy.

Em terceiro lugar, agradeço ao meu orientador professor Edilberto por sempre se mostrar disponível às minhas questões, pelo apoio às minhas ideias, pela compreensão e pelos conselhos valiosos. Agradeço também ao seu aluno de doutorado Luís Fernando por me ajudar de forma decisiva a pôr em prática os objetivos deste trabalho e pelas discussões produtivas sobre o tema.

Além disso, agradeço imensamente pelo carinho, companheirismo, experiências, compreensão e convivência, tão necessário, por parte da minha namorada e melhor amiga Laura Helena e agradeço aos nossos queridos gatos de estimação pela fofura proporcionada. Agradeço também ao meu querido amigo Wylliam pelas conversas, pelos momentos de diversão nesse período e por continuar sempre mantendo contato comigo.

Por último, agradeço à minha família, em especial à minha querida mãe Liduina e ao meu querido pai Luiz por sempre terem me ajudado de todas as formas possíveis em toda a minha trajetória de vida e por sempre terem apoiado as minhas decisões importantes. Agradeço também aos meus queridos irmãos Phiama e Phelippe pelo incondicional apoio familiar. E, em memória, agradeço ao meu querido tio Léo e ao meu querido primo Marcelo, vítimas da Covid-19, por fazerem parte de momentos memoráveis em minha vida e na de nossos familiares.

“Oh, Diamond! Diamond! Tu mal
sabes a travessura que fizeste.”

Sir Isaac Newton

RESUMO

Anéis quânticos são dispositivos mesoscópicos bidimensionais que têm sido cada vez mais investigados pela suas relações com fenômenos físicos importantes como o efeito Aharonov-Bohm, as oscilações de condutância e as correntes persistentes. Além disso, trabalhos recentes têm demonstrado interesse pela caracterização de suas propriedades físicas tais como propriedades ópticas e de condutividade, bem como pelo desenvolvimento de aplicações no ramo da spintrônica. Neste trabalho, considera-se uma amostra contendo 1400 elétrons não interagentes confinados em um anel quântico semiconductor com geometria cônica composto por arsenieto de gálio (GaAs) e sujeito a um fluxo Aharonov-Bohm que atravessa perpendicularmente o centro do anel e a um campo magnético uniforme que atinge por completo a superfície do anel paralelamente à direção do fluxo. São investigados os efeitos que a inclusão de uma massa efetiva anisotrópica acarreta nas propriedades físicas do sistema. A partir de análises numéricas, os resultados obtidos indicam que a anisotropia afeta apreciavelmente os formatos e os níveis das sub-bandas de energia e, conseqüentemente a energia de Fermi total do gás de elétrons. Ademais, foi observado que a amplitude das oscilações de magnetização e de corrente persistente no regime de campos magnéticos fracos bem como o valor do *gap* orbital variam a depender da relação entre as diferentes massas efetivas, fornecendo uma possibilidade de aprimoramento para tais propriedades.

Palavras-chave: Anéis Quânticos; Geometria Cônica; Massa Efetiva Anisotrópica.

ABSTRACT

Quantum rings are two-dimensional mesoscopic devices which have been increasingly investigated due to their relations with important physical phenomena such as Aharonov-Bohm effect, conductance oscillations and persistent currents. Moreover, recent works have been demonstrated interest for the characterization of their physical properties such as optical and conductivity properties as well as for the development of applications in spintronics field. In this work, it is considered a sample containing 1400 non-interacting electrons confined in a semiconductor quantum ring with conical geometry made of gallium arsenide (GaAs) and subjected to an Aharonov-Bohm flux passing perpendicularly through the ring center and to an uniform magnetic field reaching the entirely ring surface parallel to the flux direction. The effects in the physical properties resulted from the inclusion of an anisotropic effective mass are investigated. From the numerical analyses, the results indicate that anisotropy affects significantly both shapes and levels of the subbands and, consequently, the total Fermi energy of the electron gas. Furthermore, it was observed that both magnetization and persistent current amplitudes in the weak magnetic field regime as well as the orbital *gap* value vary depending on the relation between the different effective masses, providing a possibility of refinement on these properties.

Keywords: Quantum Rings; Conical Geometry; Anisotropic Effective Mass.

Sumário

1	Introdução	11
2	Anéis Mesoscópicos: uma Descrição do Modelo	14
2.1	Semicondutores	14
2.1.1	Bandas de Energia: Metais, Semimetais e Isolantes	15
2.1.2	Massa Efetiva	17
2.1.3	Heteroestruturas Semicondutoras	21
2.2	Aneis Quânticos e o Modelo de Tan-Inkson	24
2.2.1	Definições do Modelo	24
2.2.2	Equação de Schrödinger, Auto-energias e Autofunções	26
2.2.3	Raio Médio de Estado e Amplitude de Estado	32
2.2.4	Degenerescência	35
2.2.5	Oscilações Aharonov-Bohm	37
2.2.6	Energia de Fermi e Espessura do Anel Quântico	38
2.2.7	Magnetização	41
2.2.8	Correntes Persistentes	44
2.3	Defeitos em Matéria Condensada: Disclinação	48
3	Teoria Elementar de Superfícies	53
3.1	Superfícies Parametrizadas	53
3.2	Primeira Forma Fundamental	55
3.3	Segunda Forma Fundamental	58
3.4	Curvaturas Média e Gaussiana	59
3.5	Coordenadas Curvilíneas	61
3.6	Equações de Gauss-Weingarten	64

3.7	Curvatura Geodésica (Tangencial)	67
3.8	Teorema de Gauss-Bonnet	70
4	Mecânica Quântica de uma Partícula Confinada a uma Superfície	73
4.1	Equação de Schrödinger para uma Partícula Confinada a uma Superfície .	73
4.2	Potencial Geométrico para o Defeito Cônico	80
4.3	Aplicação de Campo Elétrico e Magnético na Superfície	82
5	Anel Mesoscópico Bidimensional com Anisotropia de Massa em Defeito Cônico	87
5.1	Massa Anisotrópica na Equação de Schrödinger	87
5.2	Auto-energias e Autofunções	90
5.3	Energia de Fermi e Espessura do Anel Quântico	96
5.4	Magnetização	99
5.5	Correntes Persistentes	103
5.6	Efeitos no <i>Gap</i> Orbital	107
6	Considerações Finais	109
A	Energia de Fermi em um Ponto Quântico	111
B	Operadores Vetoriais em Coordenadas Curvilíneas	113

Capítulo 1

Introdução

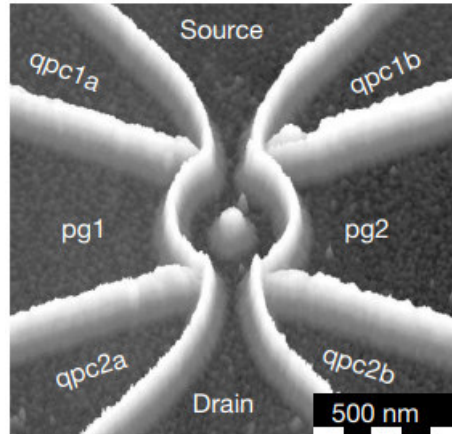
O estudo das propriedades físicas de materiais mesoscópicos (com dimensões que abrangem desde pequenos conjuntos de moléculas até organismos microscópicos) tais como suas propriedades magnéticas, ópticas e de transporte têm adquirido grande atenção de pesquisadores ao redor do mundo devido à variedade de potenciais objetos de estudo e aplicações tecnológicas que vão desde a engenharia de circuitos eletrônicos para Computação até a Medicina, tornando-a uma área muito rica e ativa da Física da Matéria Condensada tanto a nível experimental quanto teórico.

Tal cenário foi construído através do desenvolvimento de uma grande variedade de novos materiais da espessura de um átomo pelos laboratórios ao redor do mundo, possibilitado pelos avanços tecnológicos recentes. Um dos mais famosos, sem dúvida, é o grafeno [2, 3]; um material bidimensional que, devido a suas propriedades de condução térmica e elétrica, resistência mecânica e maleabilidade, tem sido objeto de interesse constante para a confecção de circuitos eletrônicos cada vez menores e mais eficientes [4] (nanoeletrônica) bem como para transportes precisos de compostos farmacêuticos pelo corpo humano [5] (*drug-delivery*).

Outro exemplo de estrutura bidimensional em evidência nesta área são os **anéis mesoscópicos** ou **aneis quânticos** (Figura 1.1) que permitem o confinamento de partículas a determinadas regiões de perfil anular. Tais estruturas têm atraído atenção na Física da Matéria condensada devido às suas correlações com fenômenos físicos como as oscilações Aharonov-Bohm [6], as correntes persistentes em metais não supercondutores [7] e o efeito Hall-Quântico [8, 9, 10].

Outro campo de aplicações recente envolvendo anéis quânticos se encontra no ramo

Figura 1.1 – Micrografia de Força Atômica de um Anel Quântico



Fonte: A. Fuhrer et. al. (2001)

da Spintrônica/Computação Quântica [11, 12]. Assim como na Computação Clássica, a Computação Quântica se baseia no processamento e armazenamento de informações em unidades básicas chamadas de **bits quânticos** ou, simplesmente, *qubits*. Para se desenvolver um *qubit*, é necessário criar um dispositivo quântico que funcione como um sistema de dois níveis e que nele seja possível controlar certos parâmetros como o número de partículas, por exemplo. Além disso, o principal desafio atualmente da Computação Quântica é conseguir manter os *qubits* estáveis, uma vez que campos eletromagnéticos e variações térmicas podem destruir facilmente o sistema quântico por conta de sua sensibilidade. A consequência disso é que, apesar da superioridade de processamento dos computadores quânticos frente ao clássicos já ser comprovada, os mesmos são capazes de operar por apenas alguns poucos minutos no máximo antes que os *qubits* comecem a ser afetados, levando-os a produzir erros e resultados pouco confiáveis [13].

No campo teórico, a geometria desempenha um papel fundamental na previsão e descrição dos defeitos topológicos em sistemas quânticos aplicados à Física do Estado Sólido, visto que efeitos puramente geométricos foram previstos em sistemas mesoscópicos com curvatura graças às contribuições de Jensen e Koppe [15] e da Costa [16], cujos estudos introduziram uma nova abordagem para sistemas bidimensionais em superfícies curvas inseridas no espaço tridimensional euclidiano. Mais precisamente, eles demonstraram a existência de um novo tipo de potencial de caráter geométrico que depende das curvaturas média e gaussiana da superfície em questão. Também deve-se destacar o trabalho de Ferrari [17] que derivou uma equação de Schrödinger que considera um potencial geométrico

na presença de um campo eletromagnético. Dessa forma, sistemas quânticos com diferentes geometrias e submetidos à diversas configurações de interações, campos elétricos, campos magnéticos e rotação [18, 19] têm sido recorrentemente explorados.

Além disso, as implicações desta área alcançam a cosmologia e a gravitação. Estudos mostram que defeitos topológicos, que surgem comumente em processos de transição de fase na matéria condensada também advém de processos similares no contexto de um universo inicial superquente e com densidade uniforme de matéria, o que pode ter levado à aglomeração para a formação de estruturas como galáxias. Katanaev e Volovich [20] mostraram em seus estudos que o mesmo formalismo geométrico da Teoria da Relatividade Geral pode ser empregado com sucesso no estudo de defeitos topológicos em materiais. Em outras palavras, há uma interconexão entre essas duas áreas a partir da qual se permite buscar entender aspectos da Cosmologia na escala mesoscópica.

Os semicondutores, por sua vez, também detêm um papel de destaque na Física da Matéria Condensada devido às suas propriedades características de condução elétrica e aplicabilidades que tiveram fundamental importância no desenvolvimento de circuitos integrados no século 20 através da invenção do transistor em 1947 por William Shockley, John Bardeen e Walter Brattain, vencedores do Prêmio Nobel de Física em 1956. Muitos dos estudos teóricos e experimentais mais recentes envolvendo anéis quânticos trabalham com uma heterojunção formada pelos semicondutores GaAs/GaAlAs, cuja massa efetiva utilizada é isotrópica. Entretanto, os semicondutores em geral possuem massa efetiva anisotrópica como é o caso do silício (Si), germânio (Ge), óxido de zinco (ZnO) e do sulfeto de cádmio (CdS) que possuem superfícies de Fermi elipsoidais [21]. Apesar disso, a Literatura ainda carece de abordagens teóricas para essa última classe de materiais, o que se deve à complexidade que as superfícies de Fermi acarretam na análise numérica.

Dessa forma, no presente trabalho, dispõe-se a investigar, a partir de abordagem inédita, os efeitos de uma massa efetiva anisotrópica nas propriedades eletrônicas, magnetização e corrente persistente em um anel quântico semiconductor com geometria cônica contendo 1400 elétrons não-interagentes e submetido a campos magnéticos externos: um fluxo Aharonov-Bohm que atravessa o centro do anel em um solenoide supercondutor e um campo magnético uniforme paralelo ao eixo do solenoide e que se estende por toda a superfície do anel.

Capítulo 2

Anéis Mesoscópicos: uma Descrição do Modelo

Neste capítulo, apresentaremos os conceitos essenciais para construção e compreensão do modelo a ser estudado. Começamos introduzindo definições e aspectos físicos acerca dos semicondutores tais como massa efetiva e anisotropia de massa. Em seguida, apresentamos o modelo matemático e os principais resultados presentes nos dois artigos de W. C. Tan e J. C. Inkson [8, 9] sobre propriedades eletrônicas, magnetização e correntes persistentes em anéis quânticos bidimensionais. Na última seção do capítulo, discutimos a inclusão e interpretação da curvatura no sistema.

2.1 Semicondutores

De maneira geral, um **semicondutor** pode ser definido como um material que apresenta resistividade elétrica à temperatura ambiente entre 10^{-2} e $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$, ou seja, uma resistividade situada entre materiais condutores e isolantes [22]. Os exemplos mais famosos de semicondutores são o silício (Si) e o germânio (Ge), amplamente utilizados para a fabricação de transistores — dispositivos que compõem circuitos integrados responsáveis por revolucionar a computação no século 20 — que tornaram os computadores cada vez menores e com maior capacidade de processamento. Outros exemplos de aplicações envolvendo semicondutores são os SSD (Solid State Drives), os comutadores, os diodos e os termistores.

2.1.1 Bandas de Energia: Metais, Semimetais e Isolantes

Diferentemente de outros cristais como o sódio (Na) e o potássio (K), os elétrons de condução nos semicondutores sofrem uma influência considerável dos íons da rede cristalina a ponto de não poderem ser descritos como um gás de elétrons livres, mas como partículas sujeitas a um potencial periódico.

Tendo isso em vista, o físico suíço Felix Bloch (1905 - 1983), demonstrou que as funções de onda para um elétron em um potencial periódico de período $\mathbf{T}$ são da forma de um elétron livre moduladas por uma função periódica $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ com a periodicidade da rede cristalina. Assim,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.1)$$

é a expressão matemática do chamado **Teorema de Bloch**, onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T})$. Tal resultado foi fundamental para se chegar a conclusão de que a relação de dispersão em tais cristais não são mais contínuas em função do vetor de onda $\mathbf{k}$ que determina o momento do elétron, mas decompostas em regiões com estados de energia permitidos (**bandas permitidas**), separadas por regiões com estados de energia proibidos de largura E_g (**bandas proibidas**) que se encontram no limite das zonas de Brillouin [22] (ver Figura 2.1).

Figura 2.1 – Efeito do Potencial Periódico na Relação de Dispersão de um Cristal Unidimensional

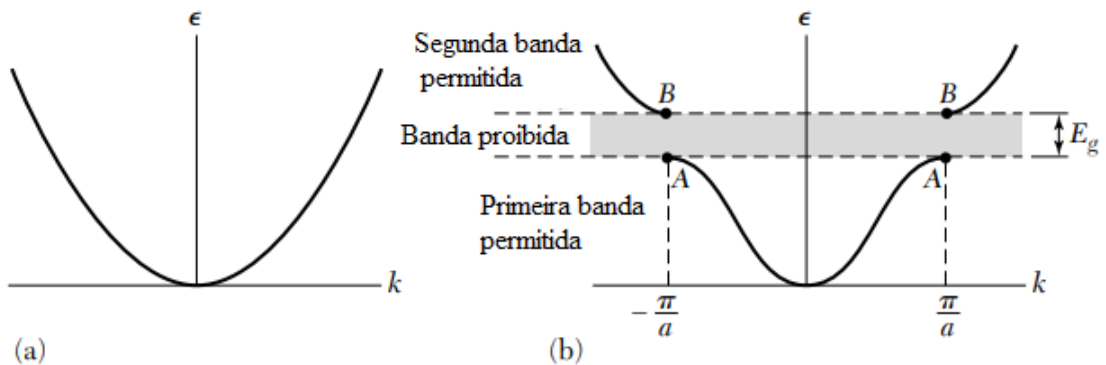


Gráfico da Relação de Dispersão para (a) Elétrons Livres e (b) Elétrons em um Potencial Periódico. E_g representa a largura da banda proibida. Fonte: Referência [22].

Um elétron que se encontra em um estado energético abaixo do limite inferior de uma banda proibida não pode ser excitado para os estados da banda permitida seguinte pelo

fato de um campo elétrico de intensidade usual não ser capaz de aumentar ligeiramente o momento do elétron no limite da zona e, conseqüentemente, aumentar sua energia por conta banda proibida. Entretanto, o campo elétrico pode fazer com que o elétron transite para outro estado desde que seja na mesma banda.

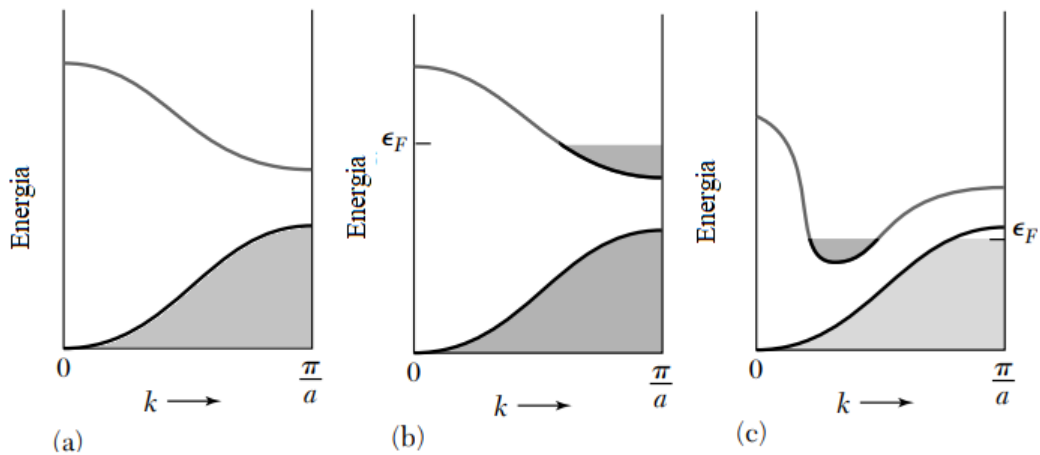
Considere agora um cristal unidimensional de formato anular composto por N células primitivas com constante de rede a . A cadeia cíclica terá, portanto, um comprimento total $L = Na$. Aplicando condições de contorno periódicas ao longo de uma volta e usando o Teorema de Bloch,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T})e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{T})} \rightarrow e^{ikNa} = 1, \quad (2.2)$$

$$k = \left\{ 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L} = \frac{\pi}{a} \right\} \quad (2.3)$$

serão os valores permitidos de k na primeira zona de Brillouin. Podemos perceber que existem N pontos independentes (o ponto $-N\pi/L$ não é independente, pois a diferença entre ele e o ponto $N\pi/L$ é um vetor da rede recíproca de módulo $2\pi/a$). Tal quantidade é válida analogamente para as outras zonas e para o caso tridimensional, desde que esse último contenha exatamente N células primitivas. Levando-se em conta a orientação do spin dos elétrons, podemos finalmente afirmar que cada banda de energia comporta até $2N$ estados independentes.

Figura 2.2 – Ocupação de Estados nas Bandas de Energia Representadas no Esquema de Zonas Reduzido



(a) Isolantes (b) Metais (c) Semi-Metais. E_f indica o maior valor de energia dentre todos os elétrons do cristal de N átomos. Fonte: Referência [22].

Esse resultado significa que, se um cristal possui um átomo divalente por célula primitiva ou dois átomos monovalentes por célula primitiva, a última banda de energia ocupada ficará completamente cheia (ver Figura 2.2a) e, portanto, um campo elétrico externo E não será capaz de alterar o momento cristalino dos elétrons em $\hbar\delta k = -eE\delta t$ e de, consequentemente, gerar uma corrente resultante, sendo então classificados como **isolantes**. O mesmo ocorre com outros cristais que possuem dois átomos tetravalentes por célula primitiva como os semicondutores silício e germânio, sendo considerados isolantes no zero absoluto.

Por outro lado, se o número de elétrons de valência for ímpar como é o caso dos **metais** como o ouro e os alcalinos, a última banda ficará cheia até a metade (ver Figura 2.2b), o que fornecerá estados disponíveis ao se aplicar um campo elétrico, produzindo corrente. A exceção a essa regra ocorre com os **semi-metais**: quando a célula primitiva possui um número par de elétrons, mas suas bandas se superpõem fazendo com que haja uma leve vacância na penúltima banda ocupada e uma leve ocupação na última (ver Figura 2.2c), um campo elétrico ainda produzirá corrente, mas com uma resposta não tão acentuada quanto nos metais. Este último caso se refere, por exemplo, aos metais alcalino-terrosos.

2.1.2 Massa Efetiva

Apesar de, como constatado anteriormente, os semicondutores serem isolantes no zero absoluto, alguns elétrons que se encontram na última banda ocupada e completamente cheia, também chamada de **banda de valência**, podem ser excitados termicamente para a banda seguinte inicialmente vazia e que recebe o nome de **banda de condução** (ver novamente o caso (a) da Figura 2.2). Tal ação é possível pois a largura da banda proibida E_g em semicondutores é relativamente menor do que a largura para isolantes e é da ordem de $k_B T$ à temperatura ambiente. A vacância deixada por tais elétrons na banda de valência (buracos) e a ocupação gerada por eles na banda de condução, permitirá que um campo elétrico externo produza corrente. Este é um dos principais motivos pelo qual os semicondutores são condutores intermediários à temperatura ambiente. Em particular, tal condutividade recebe o nome de **intrínseca**, pois está diretamente relacionada aos **portadores intrínsecos** (internos) ao cristal que foram gerados pela excitação térmica.

Além disso, existe uma condutividade em semicondutores que está associada à impurezas: um átomo de valência maior adicionado à rede cristalina original faz com que os

elétrons de valência restantes que não participarem das ligações cristalinas sejam **doados** para a banda de condução ao mesmo tempo que um portador de carga positiva remanesce no átomo **doador** devido a ionização (semicondutor tipo n). Da mesma forma, se um átomo de valência menor for inserido na rede cristalina, o mesmo irá precisar remover elétrons de ligações próximas para seu domínio (**aceitador**) de modo a poder realizar suas ligações restantes, o que irá criar um portador de carga positiva na rede (semicondutor tipo p) [22, 21]. Tal processo recebe o nome de **dopagem** e pode aumentar a condutividade de tais materiais de forma substancial. Como os portadores cedidos são externos, tal condutividade recebe o nome de **extrínseca**. A razão entre o número de portadores e o número de átomos da amostra deve ser muito pequena (da ordem de um átomo de boro a cada 10 mil em uma amostra de silício [22]), de modo que as propriedades do semicondutor não sejam alteradas globalmente.

Percebe-se que os portadores transportados à banda de condução, seja por excitação térmica ou por dopagem, ocupam regiões próximas à sua borda (ponto mais baixo) pelo fato de tal região localizar os estados menos energéticos possíveis e da concentração de tais portadores ser relativamente baixa. Enquanto isso, os buracos na banda de valência ocupam regiões próximas à parte superior da banda. Assim, vemos que os principais performadores da condução em semicondutores possuem vetores de onda próximos da fronteira de uma zona de Brillouin. Pode ser demonstrado que é possível aproximar, com razoável concordância, a relação de dispersão para o elétron em um potencial periódico a uma forma parabólica quando $\mathbf{k}$ estiver muito próximo do limite da zona [22] (ver novamente a Figura 2.2b):

$$\epsilon(K) \approx \epsilon_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e} \left(1 + \frac{2\lambda}{E_g}\right), \quad (2.4)$$

onde ϵ_c representa a energia mínima da banda de condução, $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{G}/2$ representa o vetor de onda medido a partir do limite da zona $\mathbf{G}/2$ (π/a no caso unidimensional da Figura 2.1) e λ/E_g representa a razão entre a energia de um elétron livre $\hbar^2 k^2/2m_e$ no limite da zona e a largura da banda proibida. Definindo

$$\mu = \frac{m_e}{\left(1 + \frac{2\lambda}{E_g}\right)} \quad (2.5)$$

como uma **massa efetiva**, onde m_e é a massa de repouso do elétron, têm-se

$$\epsilon(K) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu}, \quad (2.6)$$

similar à relação para um elétron livre. Esse resultado é conhecido como **aproximação de massa efetiva** [22]. Qual a interpretação física dessa massa? Em semicondutores, é mais frequente nos depararmos com massas efetivas inferiores a massa eletrônica, implicando que a quase-partícula responda à ação do campo elétrico com uma aceleração superior a que seria observada em um elétron livre*. Na tabela abaixo, apresentamos as massas efetivas de alguns semicondutores em unidades da massa do elétron m_e .

Tabela 2.1 – **Massas Efetivas dos Elétrons em Alguns Semicondutores**

Semicondutor	μ/m_e
InAs	0,026
InP	0,073
GaSb	0,047
GaAs	0,067

(a) Fonte: Referência [22].

Outra forma de compreender a massa efetiva em uma relação de dispersão, como em (2.6), é percebendo que seu inverso é determinado pela curvatura da relação de energia. De fato, em (2.6),

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon(K)}{dK^2}. \quad (2.7)$$

Dessa forma, se a relação de dispersão possui simetria esférica, o valor de μ é único em todas as direções do espaço recíproco. Por outro lado, existem muitos semicondutores que possuem relações de dispersão com simetrias distintas, como a do silício e a do óxido de zinco (ZnO) que possuem dois tipos de massas efetivas principais: a **massa efetiva longitudinal** m_l que se estende apenas sobre um eixo e **massa efetiva transversal** m_t que se estende com simetria circular sobre um plano transversal. Nesta configuração as superfícies de Fermi serão elipsoides de revolução.

Como se pode observar na definição (2.5), tanto a energia do elétron livre no limite da zona λ quanto a largura da banda proibida E_g podem afetar o valor da massa efetiva de

*Quase-partículas são artifícios matemáticos utilizados para a simplificação de problemas. Em outras palavras, substituímos um elétron (real) interagindo de forma complexa com a rede por um ‘elétron livre’ que responderia a um campo elétrico com uma massa efetiva distinta.

forma diferente nos eixos de simetria da zona de Brillouin do cristal, pois nem todas as superfícies (caso tridimensional) do limite da zona são equidistantes do centro e nem todos os semicondutores possuem o mínimo da banda de condução ϵ_c localizados na origem no espaço recíproco. Isso ocorrerá de forma mais significativa em semicondutores com **banda proibida indireta** como é o caso silício e do germânio, isto é, naqueles onde o mínimo da banda de condução não se localiza em $\mathbf{K} = 0$, permitindo que E_g apresente valores distintos em diferentes direções. Para o Si e Ge, a diferença entre as massas efetivas são de 79% e de 95%, respectivamente. Por outro lado, em semicondutores com **banda proibida direta** tal como no arsenieto de gálio (GaAs), o mínimo se localiza no centro do espaço recíproco de forma que o valor de E_g será o mesmo em todas as direções. Apesar disso, nem sempre a massa efetiva em semicondutores com banda proibida direta será isotrópica (Tabela 2.2). Nestes casos, as diferenças entre as massas efetivas costumam ser muito menores do que aquelas observadas nos semicondutores com banda proibida indireta (ver Figura 2.3b).

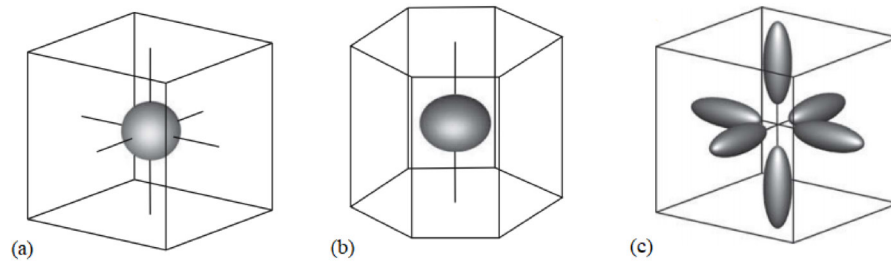
Tabela 2.2 – **Massas Efetivas Longitudinais e Transversais de Semicondutores com Banda Proibida Direta**

Semicondutor	m_l	m_t	m_t/m_l
SiC	0,29	0,42	1,448
ZnO	0,21	0,24	1,152
GaN	0,20	0,18	0,900
AlN	0,33	0,25	0,758

(a) Fonte: Referência [21].

Na Tabela 2.2, apresentamos as massas efetivas longitudinais e transversais de alguns semicondutores. Em particular, os compostos mostrados podem cristalizar em uma estrutura **hexagonal compacta**, também conhecida como *wurtzite structure* [23] e, portanto, as superfícies de Fermi elipsoidais são centradas na origem e possuem seus eixos de rotação (longitudinais) ao longo da direção vertical (ver novamente Figura 2.3b). Tais compostos servirão de modelo para nossas futuras aplicações no Capítulo 5.

Figura 2.3 – Superfícies de Fermi da Banda de Condução para Alguns Semicondutores

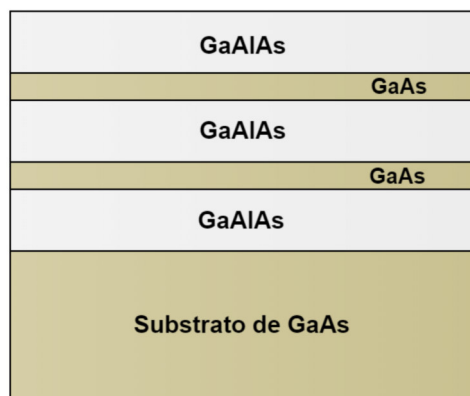


(a) GaAs (b) ZnO (c) Si. Fonte: Referência [21].

2.1.3 Heteroestruturas Semicondutoras

Heteroestruturas semicondutoras são estruturas compostas por camadas de diferentes materiais que possuem constante de rede similar, de forma que a transição de uma região para outra seja coerente, isto é, que o conjunto de camadas possa ser considerado como um monocristal [22]. Tais estruturas começaram a ser investigadas no início da década de 30 e hoje estão difundidas em diversas aplicações tecnológicas do cotidiano como *LEDs* e transistores [24].

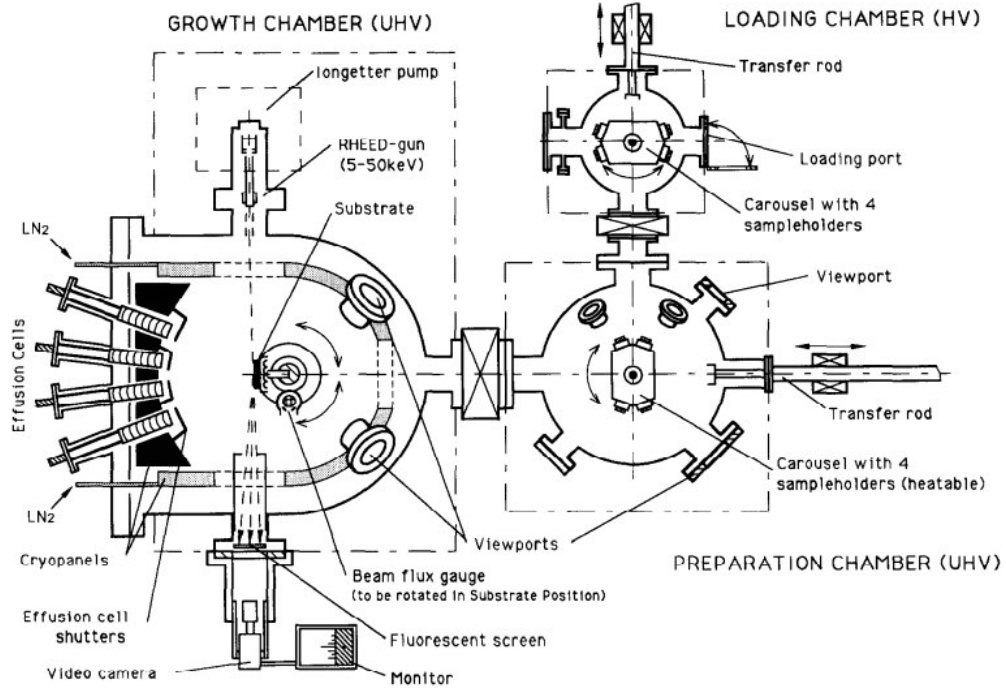
Figura 2.4 – Esquematização de uma Heteroestrutura Formada por Epitaxia



Fonte: Próprio autor.

A junção entre dois semicondutores através de uma interface é chamada de **heterojunção**. Uma das técnicas para desenvolver heteroestruturas é a **epitaxia de feixe molecular**, ou seja, uma deposição sucessiva de camadas compostas por diferentes materiais sobre um substrato [25]. O procedimento está esquematizado na figura a seguir:

Figura 2.5 – Epitaxia de Feixe Molecular



Fonte: Referência [25].

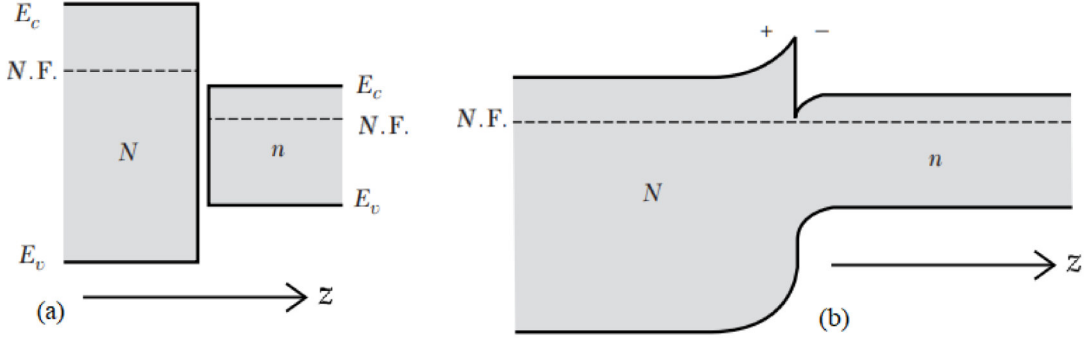
Tudo começa na câmara de carga (*loading chamber*), através da qual o substrato é inserido e transportado para a câmara de preparo (*preparation chamber*), onde o material é submetido ao calor visando à retirada de impurezas. Em seguida, o substrato é novamente transportado para a câmara de crescimento (*growth chamber*) na qual podem existir diversas células de efusão que são aquecidas a fim de produzirem feixes de partículas direcionadas ao substrato e que irão se depositar sobre o mesmo, formando uma camada.

Considere uma heterojunção tipo $n - N$ à temperatura T tal que $\epsilon_c - \epsilon_v \gg k_B T$ ou, em outras palavras, uma junção na qual o semiconductor do tipo N possui uma maior concentração de elétrons advindos de doadores do que o semiconductor do tipo n . Isso acarretará que os níveis de Fermi[†] $N.F.$ (relacionado à concentração de portadores) nos dois semicondutores sejam distintos. Além disso, vamos supor que o semiconductor do tipo n possua uma banda proibida de largura menor que a do semiconductor tipo N e que as

[†]Existe uma diferença entre **energia** de Fermi e **nível** de Fermi: a primeira está relacionada ao valor máximo de energia do sistema e só deve ser definida no zero absoluto. A segunda, corresponde ao valor de energia no qual a **distribuição de Fermi-Dirac** assume o valor $1/2$ para qualquer valor de temperatura. Note que, diferentemente da energia de Fermi, os níveis de Fermi da Figura 2.6a se situam dentro da banda proibida.

mesmas estejam dispostas em um **alinhamento normal** como mostrado na Figura 2.6.

Figura 2.6 – **Representação da Formação um Poço de Potencial através de um Heteroestrutura**



- (a) Banda de condução para dois semicondutores com níveis de Fermi distintos inicialmente separados.
(b) Banda de condução após a junção. Fonte: Referência [22].

Quando os dois semicondutores inicialmente separados (Figura 2.6a) são unidos através da interface, o equilíbrio termodinâmico irá requerer que o nível de Fermi se iguale através da heterojunção de modo a não permitir corrente resultante, uma vez que não há tensão aplicada. Isso acarretará em uma transferência de elétrons do lado N próximos à interface para o lado n da interface, gerando uma carga espacial positiva no lado N e uma carga espacial negativa no lado n , formando uma estrutura similar a um capacitor. Lembrando que no equilíbrio térmico $\mu = \frac{E_c + E_v}{2} + qV = \text{constante}$ [22] e que o potencial associado a um capacitor de placas paralelas com densidade superficial de carga σ é igual a $V = \sigma d / \epsilon_0$, teremos que

$$\bar{E} = -\frac{2q\sigma z}{\epsilon_0} + \text{constante}, \quad (2.8)$$

onde $\bar{E}$ corresponde ao ponto médio entre o topo da banda de valência e o mínimo da banda de condução. Para uma carga de teste $q < 0$, vemos que o ponto médio entre as bandas para os dois semicondutores sofrerá uma elevação na região onde $V \neq 0$. Dessa forma, na Figura 2.6b um poço de potencial é formado na interface entre os dois semicondutores. Isto se deve ao fato de que elétrons que migraram de N para n serão atraídos por seus respectivos íons doadores ao passo que o equilíbrio do potencial químico irá impedir que retornem, fazendo com que se mantenham aprisionados na região do poço quântico, formando um gás de elétrons bidimensional.

Um exemplo prático de heteroestrutura tipo $n - N$ com alinhamento normal de ban-

das é a GaAlAs/GaAs, onde o GaAs faz o papel do semiconductor tipo n , enquanto que o GaAlAs faz o papel do semiconductor tipo N . Esse dispositivo experimental têm sido recorrentemente desenvolvido e estudado devido às suas aplicações no entendimento de diversos fenômenos físicos importantes como o efeito Aharonov-Bohm, as correntes persistentes e o efeito Hall quântico [7, 8, 10]. Portanto, é sobre este arcabouço experimental que será baseado o modelo teórico a ser apresentado a seguir.

2.2 Aneis Quânticos e o Modelo de Tan-Inkson

A abordagem a ser utilizada neste trabalho foi proposta originalmente por W. C. Tan e J. C. Inkson em 1996 [8] para um potencial que descreve um anel quântico bidimensional isolado com espessura finita. O modelo possui dois parâmetros a_1 e a_2 que podem ser ajustados de forma independente e conveniente de modo a variar o raio e a espessura do anel para se obterem limites correspondentes a outros diferentes objetos tais como **pontos quânticos** (quantum-dots), **anti-pontos quânticos** (anti-dots), **aneis unidimensionais** e **fios retos bidimensionais**. Nesta seção, serão apresentados o modelo propriamente dito e os resultados obtidos para auto-energias, autofunções, propriedades eletrônicas, magnetização e correntes persistentes quando se inclui um campo magnético $\mathbf{B}$ uniforme ao plano do anel e um fluxo quantizado que passa através de um solenoide no centro do anel [9].

2.2.1 Definições do Modelo

O modelo é definido matematicamente por um potencial radial da forma

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.9)$$

onde a_1 e a_2 são os parâmetros do anel e V_0 é uma constante arbitrária escolhida de modo a fixar o mínimo do potencial em zero. Tal potencial apresenta um comportamento fortemente repulsivo para $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$, confinando as partículas em uma região central em torno de um mínimo, o que define a estrutura de anel. Em termos dos parâmetros a_1 e a_2 , o ponto de mínimo r_0 , também chamado de **raio médio do anel**, é dado por

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = -\frac{2a_1}{r_0^3} + 2a_2 r_0 = 0 \quad \rightarrow \quad r_0 = \left(\frac{a_1}{a_2} \right)^{1/4} \quad (2.10)$$

e, então, $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$. Dessa forma, reescrevemos o potencial como

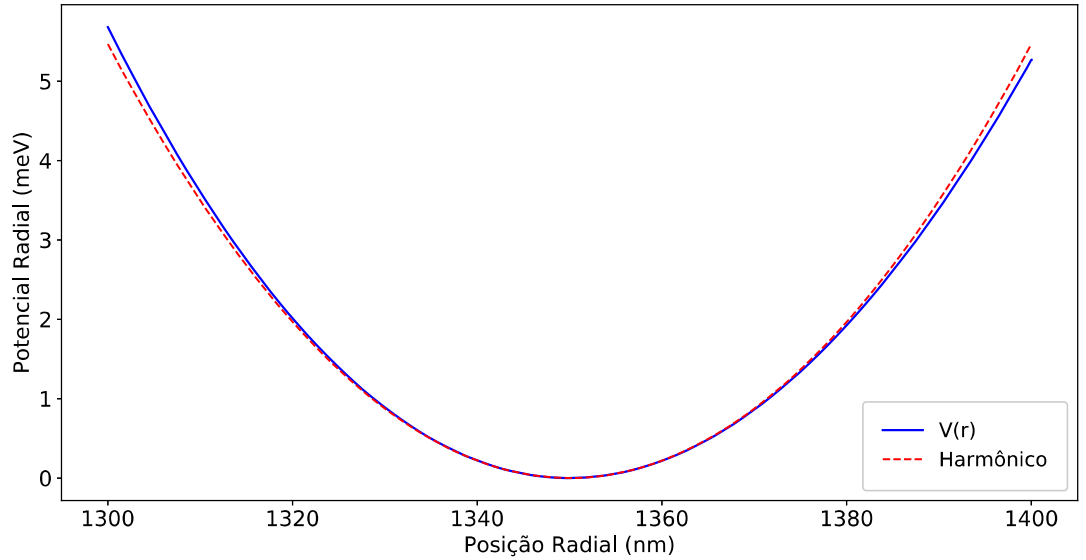
$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - 2\sqrt{a_1 a_2}. \quad (2.11)$$

Para $r \approx r_0$, pode ser mostrado, usando a expansão em Série de Taylor, que o potencial confinante (2.11) pode ser aproximado por um potencial harmônico da forma

$$V(r) = \frac{1}{2} (8a_2) (r - r_0)^2 + \dots \approx \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (r - r_0)^2, \quad (2.12)$$

onde $\omega_0^2 = 8a_2/\mu$ e μ é a massa efetiva do elétron introduzida anteriormente. Os comportamentos do potencial de Tan-Inkson (2.11) e da aproximação harmônica (2.12) em função da posição radial são mostrados na Figura 2.7 para uma estrutura bidimensional composta pelo semiconductor GaAs cujos parâmetros[‡] $r_0 = 1350$ nm e $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV são os mesmos usados em [9]. Pode ser observado claramente a assimetria do potencial confinante em relação ao raio médio do anel, o que reflete que a repulsão interna é mais forte do que a externa.

Figura 2.7 – **Potencial de Tan-Inkson e Aproximação Harmônica**



Fonte: Próprio autor.

[‡]O raio médio do anel pode ser estimado através de Microscopia de Força Atômica (AFM) [14]. Em relação à quantidade $\hbar\omega_0$, consulte o APÊNDICE A para mais detalhes.

2.2.2 Equação de Schrödinger, Auto-energias e Autofunções

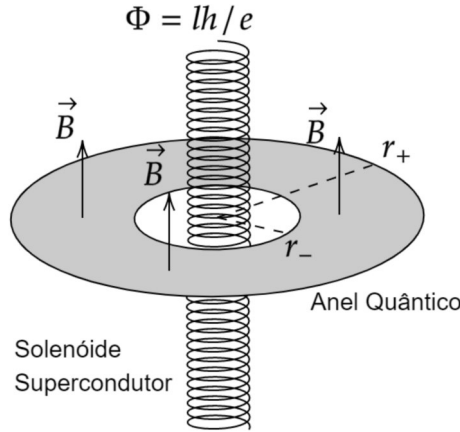
Visando a obtenção das propriedades eletrônicas do anel quântico, vamos conceber o seguinte arranjo (Figura 2.8): considera-se um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ perpendicular ao plano do anel e um fluxo magnético quantizado $\Phi = l\phi_0 = \frac{l\hbar}{e}$ através de um solenóide supercondutor[§] que passa através do centro do anel, onde ϕ_0 é o **quantum de fluxo**. Desse modo, o Hamiltoniano de um elétron de massa efetiva μ será dado mediante acoplamento mínimo por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 + V(r) \quad (2.13)$$

com $\mathbf{A} = \left(\frac{1}{2}Br + \frac{l\hbar}{er} \right) \hat{\varphi}$. Expandindo o termo entre parênteses,

$$\left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 = \nabla^2 + \frac{ie}{\hbar} \nabla \cdot \mathbf{A} + 2\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \nabla - \frac{e^2}{\hbar^2} \mathbf{A}^2. \quad (2.14)$$

Figura 2.8 – Esquematização da Abordagem Física do Problema



Para efeito de simplificação dos cálculos, o spin das partículas (elétrons) não está sendo considerado [8].

Fonte: Próprio autor.

Usando a expressão geral da divergência em coordenadas cilíndricas fornecida no APÊNDICE B, concluiremos imediatamente que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Além disso, obtemos que

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{4} \left(B^2 r^2 + 2 \frac{Bl\phi_0}{\pi} + \frac{l^2 \phi_0^2}{\pi^2 r^2} \right) \quad (2.15)$$

[§]Tal expressão difere do resultado obtido pela Teoria BCS dos supercondutores por um fator 2 no denominador. Isso se deve ao fato de que não consideraremos o spin das partículas em nossos cálculos.

e

$$\mathbf{A} \cdot \nabla = \frac{1}{2}B \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} \frac{l\phi_0}{\pi r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.16)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right)^2 - \frac{ieB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right) \right\} \\ & + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Agora, estamos preparados para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.18)$$

Primeiramente, note que, como o Hamiltoniano não depende explicitamente da coordenada φ , pode-se supor uma solução (*ansatz*) da forma

$$\psi(r, \varphi) = N f(r) e^{-im\varphi}, \quad (2.19)$$

onde m é um inteiro, a princípio livre, e N é uma constante de normalização. Substituindo essa forma na equação de Schrödinger, obtemos a equação para a parte radial

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df}{dr} - \left\{ \frac{r^2}{4\lambda^4} + \frac{M^2}{r^2} - S^2 \right\} f(r) = 0, \quad (2.20)$$

onde definimos

$$M = \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}}, \quad S^2 = \left[\frac{eB}{\hbar} (m-l) + \frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2} \right] \quad (2.21)$$

e

$$\left[\frac{2\mu a_2}{\hbar^2} + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} \right] = \frac{1}{4\lambda^4}, \quad \text{com} \quad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}, \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2} \quad \text{e} \quad \omega_c = \frac{eB}{\mu} \quad (2.22)$$

sendo, respectivamente, o comprimento magnético efetivo, a frequência de ciclotron efetiva e a frequência de ciclotron.

Fazendo a mudança de variável $r \rightarrow \sqrt{2}\lambda\xi$ na equação diferencial (2.20) e multiplicando-a por $2\lambda^2$,

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{df}{d\xi} - \left\{ \xi^2 + \frac{M^2}{\xi^2} - 2\lambda^2 S^2 \right\} f(\xi) = 0. \quad (2.23)$$

Tal equação diferencial não parece muito sugestiva, porém podemos analisar o **comportamento assintótico** da mesma:

No limite assintótico de $\xi \rightarrow \infty$, a equação (2.23) se transforma em

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - \xi^2 f(\xi) \approx 0, \quad (2.24)$$

cuja solução geral é dada por

$$f(\xi \rightarrow \infty) = Ae^{\xi^2/2} + Be^{-\xi^2/2}. \quad (2.25)$$

Exigindo uma solução bem comportada para ξ grande, devemos impor $A = 0$ e, então,

$$f(\xi \rightarrow \infty) = Be^{-\xi^2/2}. \quad (2.26)$$

Agora, aplicando o limite assintótico de $\xi \rightarrow 0$ em (2.23), obtemos

$$\xi^2 \frac{d^2 f}{d\xi^2} + \xi \frac{df}{d\xi} - M^2 f(\xi) \approx 0 \quad (2.27)$$

que tem, por solução geral,

$$f(\xi \rightarrow 0) = C\xi^M + D\xi^{-M}, \quad (2.28)$$

onde, pela necessidade de uma função de onda quadraticamente integrável, fixamos $D = 0$ para ficarmos com

$$f(\xi \rightarrow 0) = C\xi^M. \quad (2.29)$$

Incorporando as constantes B e C na constante de normalização N , a solução geral da parte radial tem a forma

$$f(\xi) = N\xi^M e^{-\xi^2/2} h(\xi), \quad (2.30)$$

onde $h(\xi)$ é a solução bem comportada entre os limites assintóticos. Fazendo agora uma nova substituição $\xi^2 \rightarrow x$,

$$f(x) = Nx^{M/2} e^{-x/2} h(x) \quad (2.31)$$

e, então,

$$\frac{df}{d\xi} = 2\sqrt{x} \frac{df}{dx} \quad \text{e} \quad \frac{d^2 f}{d\xi^2} = 4x \frac{d^2 f}{dx^2} + 2 \frac{df}{dx}. \quad (2.32)$$

Substituindo esses resultados em (2.23), temos que

$$x \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{df}{dx} - \left\{ \frac{x}{4} + \frac{M^2}{4x} - \frac{\lambda^2 S^2}{2} \right\} f(x) = 0. \quad (2.33)$$

Além disso, de (2.31),

$$\frac{df}{dx} = \left[\frac{dh}{dx} + \frac{h(x)}{2} \left(\frac{M}{x} - 1 \right) \right] x^{M/2} e^{-x/2} \quad (2.34)$$

e

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \left[\frac{d^2 h}{dx^2} + \left(\frac{M}{x} - 1 \right) \frac{dh}{dx} + \left(\frac{M^2}{4x^2} - \frac{M}{2x} + \frac{1}{4} - \frac{M}{2x^2} \right) h(x) \right] x^{M/2} e^{-x/2}. \quad (2.35)$$

Usando tais resultados em (2.33), obtemos

$$x \frac{d^2 h}{dx^2} + [(M+1) - x] \frac{dh}{dx} - Kh(x) = 0, \quad (2.36)$$

onde $K = \frac{(M+1)}{2} - \frac{\lambda^2 S^2}{2}$. A equação diferencial (2.36) tem exatamente a mesma forma da **equação diferencial hipergeométrica confluyente**:

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (c - x) \frac{dy}{dx} - ay(x) = 0, \quad (2.37)$$

cuja solução, quando o parâmetro a for nulo ou um inteiro negativo [26], será um polinômio da forma

$$y(x) = {}_1F_1(a, c, x) \quad (2.38)$$

que é a **função hipergeométrica confluyente**. Então, associando (2.36) com (2.37),

$$h(x) = {}_1F_1(K, M+1, x). \quad (2.39)$$

Dessa forma, a solução radial completa $f(x) = h(x)x^{M/2}e^{-x/2}$ será

$$f(x) = Nx^{M/2}e^{-x/2} {}_1F_1(K, M+1, x). \quad (2.40)$$

Em termos da coordenada radial r , a solução completa $\psi(r, \varphi) = f(r)e^{-im\varphi}$ é, então, dada por

$$\psi(r, \varphi) = \frac{N}{2^{M/2}} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^M e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2} {}_1F_1 \left(K, M+1, \frac{1}{2} (r/\lambda)^2 \right) e^{-im\varphi}. \quad (2.41)$$

Ainda não normalizamos a função de onda completa. Antes de fazermos isso, vamos obter as auto-energias. Fixando K como um inteiro nulo ou negativo,

$$K = \frac{(M+1)}{2} - \frac{\hbar}{2\mu\omega} \left[\frac{eB}{\hbar} (m-l) + \frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2} \right] = -n, \quad (2.42)$$

sendo $n = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. Resolvendo para a energia,

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) \hbar\omega - \frac{(m-l)}{2} \hbar\omega_c - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2 \quad (2.43)$$

são as auto-energias do anel quântico com um campo magnético uniforme perpendicular ao plano do anel e um fluxo Aharanov-Bohm que passa através de seu centro, onde $n = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ e $m = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$. Na ausência de potencial confinante e considerando $l = 0$, a expressão (2.43) se reduz a

$$E_{\bar{n}} = \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c, \quad \bar{n} = n + \frac{|m| - m}{2} \geq 0 \quad (2.44)$$

correspondente às energias dos **níveis de Landau**.

Para o cálculo da constante de normalização N , usamos uma relação entre os **polinômios associados de Laguerre** e as funções hipergeométricas confluentes fornecida em [26]:

$${}_1F_1(-n, M+1, x) = \frac{M!n!}{(M+n)!} L_n^M(x). \quad (2.45)$$

Lançando mão da relação de ortogonalidade dos polinômios associados de Laguerre

$$\int_0^\infty L_n^k(x) L_l^k(x) x^k e^{-x} dx = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{nl}, \quad (2.46)$$

a condição de normalização da probabilidade total da função de onda (2.41) leva a

$$\int \psi^*(r, \varphi) \psi(r, \varphi) d^2\mathbf{r} \equiv 2\pi\lambda N^2 \left[\frac{M!n!}{(M+n)!} \right]^2 \int_0^\infty (L_n^M(x))^2 x^M e^{-x} dx = 1, \quad (2.47)$$

$$N = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{(M+n)!}{2\pi(M!)^2 n!}}. \quad (2.48)$$

Por fim, usando a identidade $\Gamma(x+1) = x!$ das **funções gama** e substituindo em (2.41),

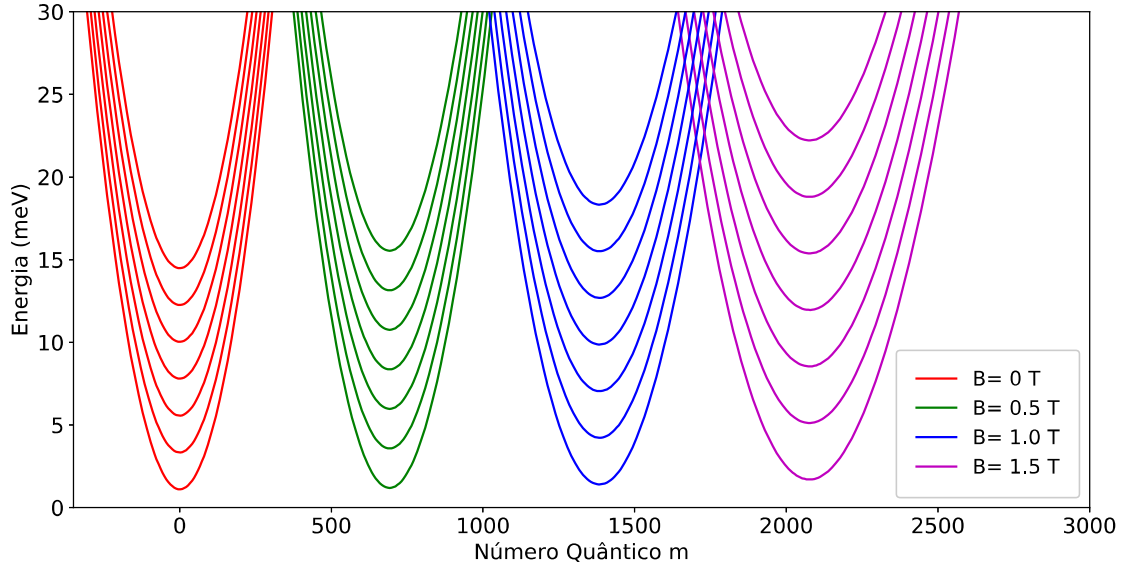
$$\psi_{n,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\Gamma(M+n+1)}{2^{M+1}\pi(\Gamma(M+1))^2 n!}} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^M e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2} {}_1F_1\left(-n, M+1, \frac{1}{2}(r/\lambda)^2\right) e^{-im\varphi} \quad (2.49)$$

são as correspondentes autofunções do sistema que também dependem de n e m .

O limitante para o número quântico m advém do número de elétrons no sistema. No zero absoluto, um total de N_e elétrons deverão ocupar os estados $\psi_{n,m}$ com menor energia. A energia do último estado a ser preenchido será denominada de **energia de Fermi**. Na figura abaixo, esboçamos o gráfico das sete sub-bandas (curvas que comportam estados com mesmo valor de n) de energia mais baixas em função do número quântico m para diferentes valores do campo magnético B , mas com fluxo magnético nulo (pois nosso

objetivo é analisar as influências de B e do fluxo separadamente). Os parâmetros do anel utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm em uma amostra de GaAs, cuja massa efetiva é igual a $\mu = 0,067m_e$. Podemos observar que, para um dado valor de campo magnético, existem estados com diferentes valores de n e m que atingem o mesmo valor de energia.

Figura 2.9 – Gráfico das Sub-bandas como Função do Número Quântico m



Para um valor de campo magnético específico, as diferentes curvas representam os estados principais n a partir do estado fundamental. Fonte: Próprio autor.

Os mínimos das sub-bandas se situam sobre o mesmo $m = m_0$ para um determinado valor do campo magnético e se separam horizontalmente de forma linear com o valor de B . De fato,

$$\frac{dE_{n,m}}{dm} = \frac{m}{2\sqrt{m^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}}} \hbar\omega - \frac{\omega_c}{2} = 0, \quad (2.50)$$

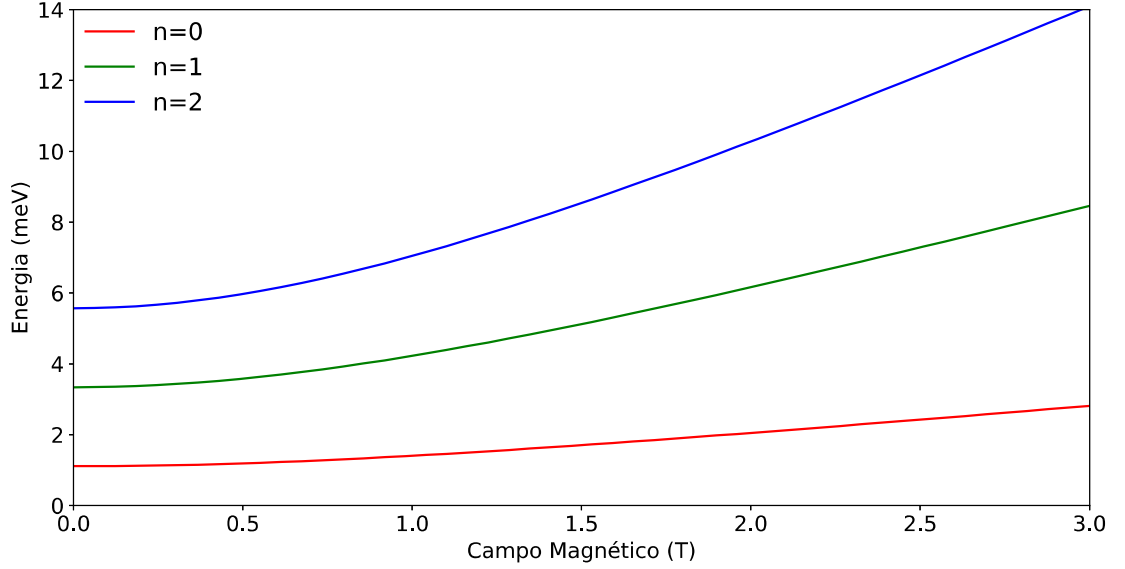
$$m_0 = \frac{\omega_c}{\omega_0} \sqrt{\frac{2a_1\mu}{\hbar^2}} = \frac{eBr_0^2}{2\hbar}. \quad (2.51)$$

Também pode ser observado na figura anterior que, à medida que o campo magnético aumenta, o valor energético correspondente aos mínimos das sub-bandas e o espaçamento entre as mesmas também aumenta. Substituindo (2.51) em (2.43),

$$E_{n,m_0} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r_0^4 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}} \right) \sqrt{\frac{e^2 B^2}{\mu^2} + \omega_0^2} - \frac{e^2 B^2}{4\mu} r_0^2 - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2, \quad (2.52)$$

que apresenta o seguinte comportamento gráfico para diferentes valores de n em função do campo magnético, expresso na Figura 2.10: A elevação energética dos mínimos das

Figura 2.10 – Mínimo das Sub-bandas de Energia em Função do Campo Magnético



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

sub-bandas com o conseqüente afastamento entre as mesmas devido ao aumento do campo magnético levará a uma dinâmica quanto a população e a despopulação de elétrons nas sub-bandas para uma dada quantidade fixa N_e de elétrons, afetando o comportamento a Energia de Fermi.

2.2.3 Raio Médio de Estado e Amplitude de Estado

Reescrevendo o Hamiltoniano H_m resultante de $H\psi = NH_m f(r)$ em (2.18) e considerando novamente $l = 0$,

$$\hat{H}_m = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + u_m(r), \quad (2.53)$$

podemos considerar

$$u_m(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{r^2} - \frac{eB}{\hbar} m + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 \right) + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \quad (2.54)$$

como um ‘potencial radial efetivo’. O ponto de estabilidade para um estado de momento angular m , também chamado de **raio médio do estado** r_m , se situará no ponto de

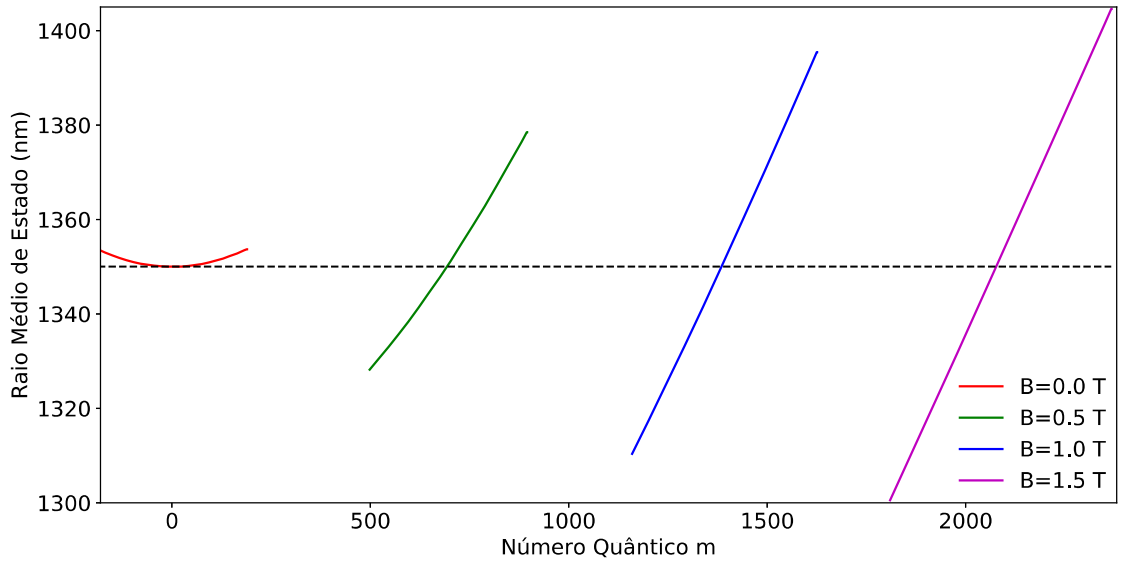
mínimo desse potencial. Dessa forma,

$$\left. \frac{du_m(r)}{dr} \right|_{r=r_m} = \left(2a_2 + \frac{e^2 B^2}{4\mu} \right) r_m - \left(2a_1 + \frac{\hbar^2 m^2}{\mu} \right) \frac{1}{r_m^3} = 0 \quad (2.55)$$

que irá resultar em, a partir das definições (2.21) e (2.22),

$$r_m = \sqrt{2M\lambda}. \quad (2.56)$$

Figura 2.11 – **Faixas de Raio Médio de Estado para Diferentes Valores de Campo Magnético.**



A linha tracejada representa o raio médio do anel $r_0 = 1350 \text{ nm}$ e a sua interseção com as demais curvas determina o mínimo das sub-bandas. Fonte: Próprio autor.

Podemos interpretar tal resultado como uma posição radial média que determinado elétron em um estado de momento angular m terá do centro do anel, isto é, uma distância em torno da qual a partícula oscila. Note que estados com diferentes valores de número quântico n podem apresentar o mesmo raio médio de estado para um B constante (Figura 2.11). No regime de campo magnético nulo, os estados com $m = 0$ possuem o menor raio médio de estado que coincide com o raio médio do anel r_0 . Se dividirmos o anel em duas regiões radiais **interna** (para $r < 1350 \text{ nm}$) e **externa** (para $r > 1350 \text{ nm}$), os estados com $|m| > 0$ para $B = 0$ ocuparão principalmente o lado externo do anel. Porém, à medida que o campo magnético aumenta, se substituirmos a expressão para m_0 em (2.56), concluiremos que $r_{m_0}(B) = r_0$. Ou seja, o ponto de mínimo em cada sub-banda

sempre estará associado ao raio médio do anel r_0 . Logo, como passam a existir estados com valor de m menor que m_0 (Figura 2.9), os elétrons cada vez mais irão ocupar o lado interno do anel até que todos os estados estejam distribuídos simetricamente nas duas regiões.

Além de uma posição radial média, é possível determinarmos a **amplitude de estado**, isto é, o limite radial clássico que um elétron pode atingir antes de superar o potencial radial efetivo $u_m(r)$. Tal região será determinada resolvendo a equação a seguir para um dado valor de energia:

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{r^2} - \frac{eB}{\hbar} m + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 \right) + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0. \quad (2.57)$$

Usando novamente as definições em (2.21) e (2.22), podemos reescrever a equação anterior como

$$\frac{r^4}{4\lambda^4} - S^2 r^2 + M^2 = 0, \quad (2.58)$$

cujas raízes serão:

$$r_{>} = \sqrt{2}\lambda \left(\lambda^2 S^2 + \sqrt{S^4 \lambda^4 - M^2} \right)^{1/2} \quad \text{e} \quad r_{<} = \sqrt{2}\lambda \left(\lambda^2 S^2 - \sqrt{S^4 \lambda^4 - M^2} \right)^{1/2} \quad (2.59)$$

Após um pouco de manipulação algébrica,

$$d_n = r_{>} - r_{<} = 2\lambda \sqrt{2n+1}. \quad (2.60)$$

Uma vez que $\lambda \approx 22,6 \text{ nm}$, amplitude mínima de um estado quando B é nulo é igual a $d_0(B=0) = 45,2 \text{ nm}$.

Vamos analisar agora a relação entre os raios médios e amplitudes de estado para dois estados (n_1, m_1) e (n_2, m_2) **degenerados** no regime de campo magnético e fluxo nulos. Igualando os autovalores de energia fornecidos em (2.43) para os dois estados, temos que:

$$\left(n_1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{m_1^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} \right) \hbar \omega_0 - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2 = \left(n_2 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{m_2^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} \right) \hbar \omega_0 - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2,$$

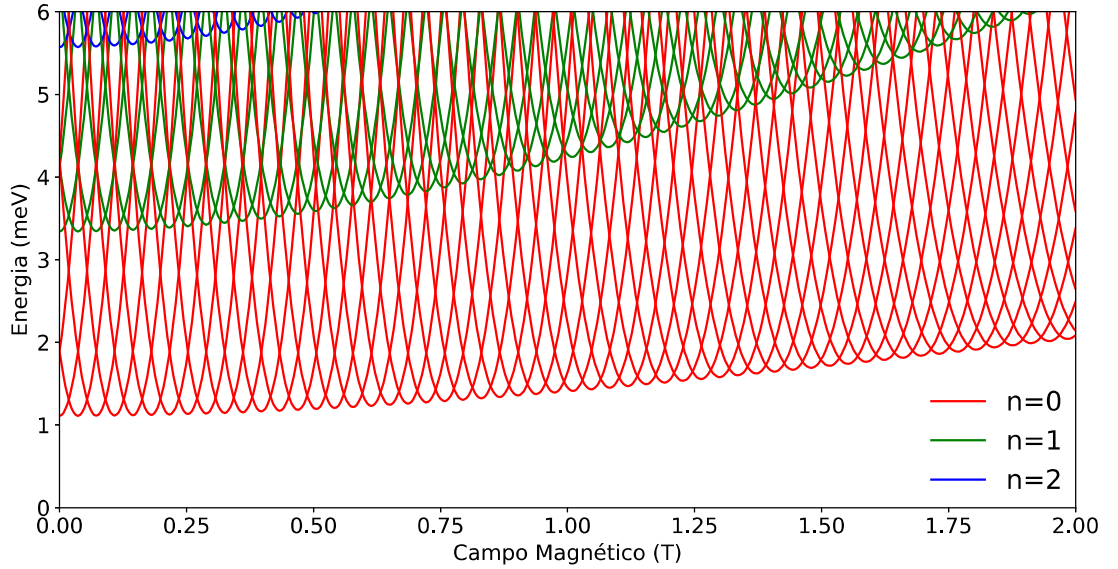
$$2(n_1 - n_2) = \sqrt{m_2^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} - \sqrt{m_1^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}}. \quad (2.61)$$

Do resultado anterior, podemos concluir que se $n_1 > n_2$, $|m_1| < |m_2|$. Portanto, para dado grupo de estados degenerados, aqueles com maiores valores de n terão as maiores amplitudes e, porém, os raios médios mais próximos de $r_0 = 1350 \text{ nm}$. Enquanto isso, os estados com menores amplitudes possuem os valores de raio médio mais externos (ver novamente Figura 2.11).

2.2.4 Degenerescência

Podemos observar os efeitos da degenerescência dos estados preenchendo as sub-bandas na Figura 2.12. Cada curva com sua respectiva cor representa um estado $\psi_{n,m}$ do sistema à $l = 0$ e como o seu valor energético evolui com B a partir da equação (2.43). Percebe-se que as linhas vermelhas ($n = 0$) também podem ocupar as mesmas regiões energéticas das linhas verdes ($n = 1$) e linhas azuis ($n = 2$). Note que os contornos que separam as regiões energéticas são delimitados pelas mesmas curvas apresentadas na Figura 2.10.

Figura 2.12 – Efeito da Degenerescência no Preenchimento das Sub-bandas



Cada curva no gráfico representa um valor de m . Curvas com a mesma cor correspondem à estados com o mesmo número quântico n . Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

Nos últimos resultados, obtivemos o comportamento dos níveis de energia do sistema considerando apenas a influência do campo magnético $\mathbf{B}$ e mantendo $\Phi = 0$. Agora, iremos analisar a influência do fluxo magnético no sistema isoladamente, isto é, fixaremos $B = 0$. Calculando novamente o valor de $m = m_0$ para o qual se situa o mínimo das sub-bandas à medida que l varia a partir de (2.43),

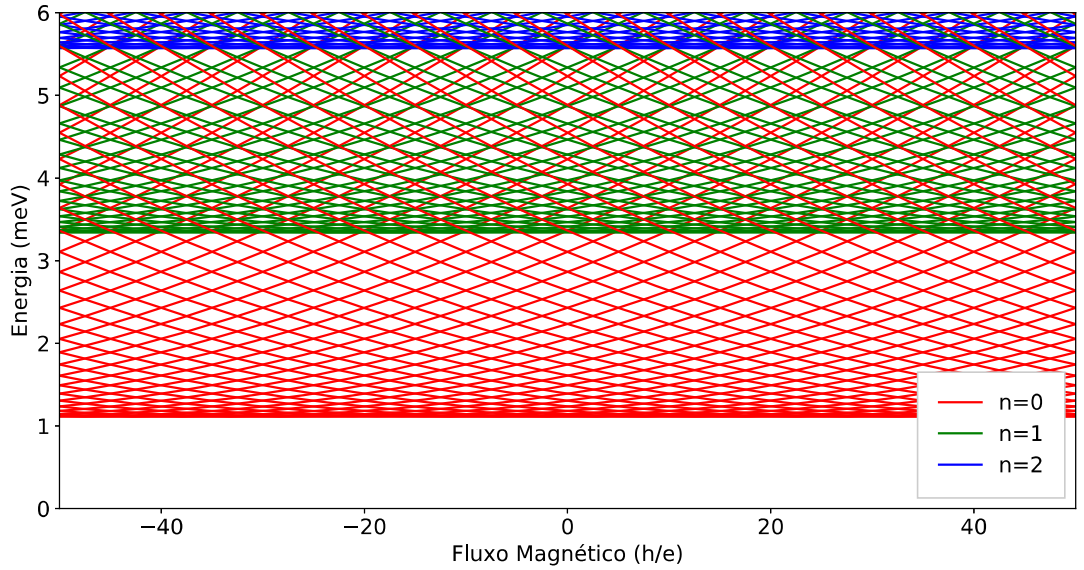
$$\frac{dE_{n,m}}{dm} = \frac{(m-l)}{\sqrt{(m-l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}}} \hbar\omega = 0 \rightarrow m_0 = l. \quad (2.62)$$

Substituindo esse resultado em (2.43),

$$E_{n,m_0} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2a_1\mu}{\hbar^2}} \right) \hbar\omega_0 - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2 \quad (2.63)$$

que é simplesmente o caso particular de $B = 0$ na expressão (2.52). Assim, vemos que, como não há dependência em l , o mínimo de energia das sub-bandas e, consequentemente, o espaçamento entre elas permanecem constantes em função do fluxo magnético como se pode ver claramente na Figura 2.13. Entretanto, ainda se nota a degenerescência e a influência de l na energia dos estados. Além disso, caso B seja nulo, as sub-bandas serão basicamente uma função modular em $m-l$. Assim, pode-se concluir que o fluxo magnético isoladamente não influencia a energia de Fermi do sistema.

Figura 2.13 – Ocupação das Sub-bandas em Função do Fluxo Magnético.



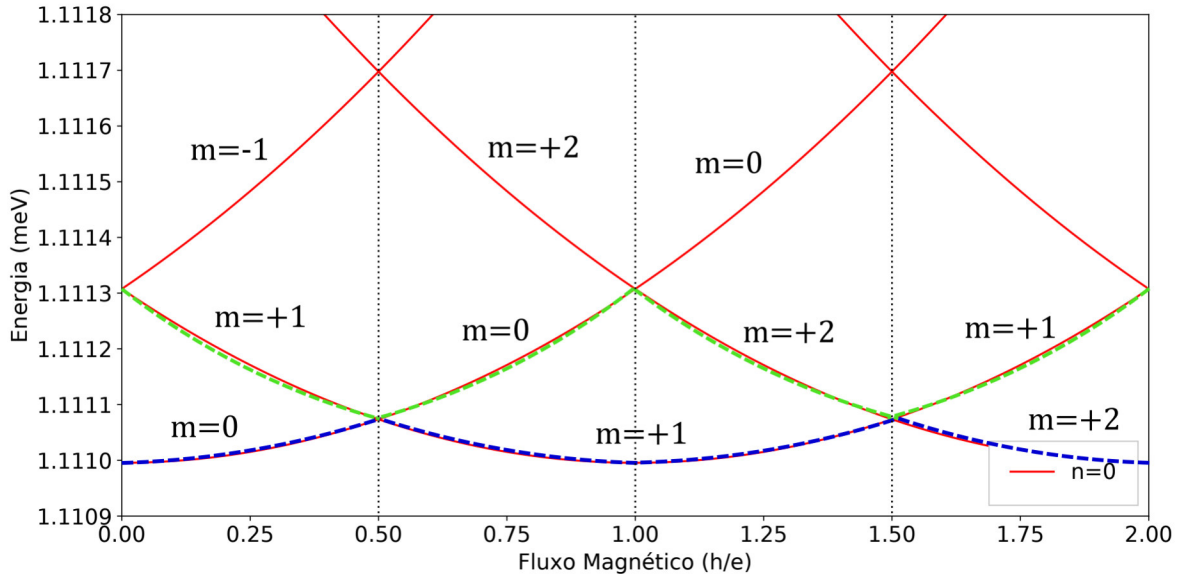
Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

Uma vez que já abordadas a degenerescência dos estados e o comportamento das sub-bandas de energia como função do campo magnético e do fluxo, estamos preparados para discutir, de forma mais clara, a energia de Fermi e suas implicações nas propriedades do sistema.

2.2.5 Oscilações Aharonov-Bohm

As **oscilações Aharonov-Bohm** (AB) ou **oscilações de estado** se referem ao comportamento da energia de um determinado elétron ao transitar entre diferentes estados $\psi_{n,m}$ à medida que o campo ou o fluxo magnético variam.

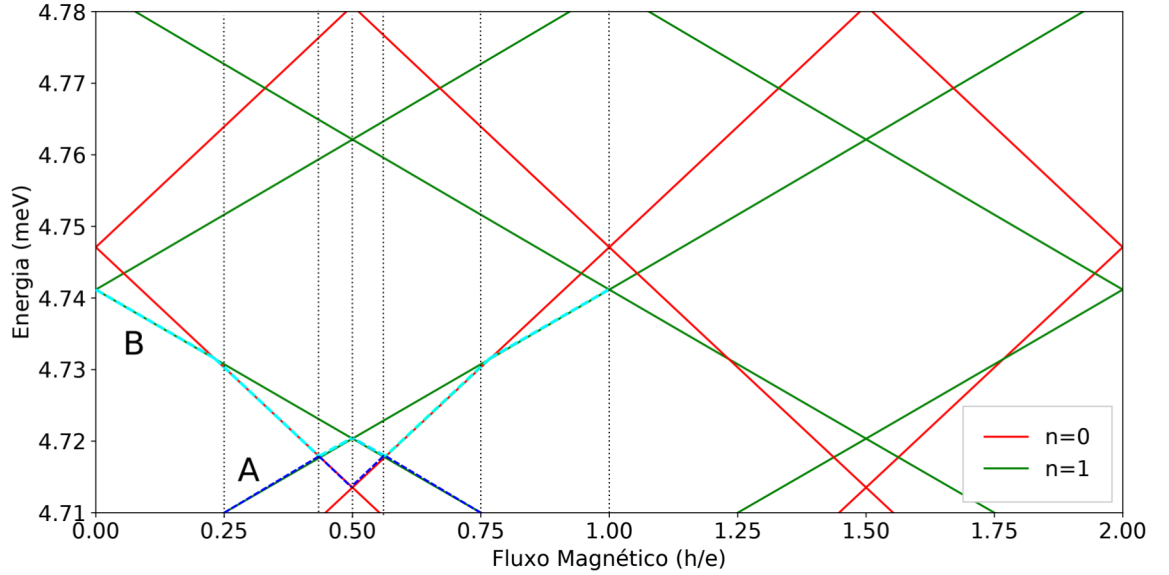
Figura 2.14 – Ilustração das Oscilações Aharonov-Bohm



As curvas tracejadas (azul e verde) que se sobrepõem às curvas de estado (vermelhas) na sub-banda fundamental representam o comportamento de elétrons distintos. Fonte: Próprio autor.

Observe a figura acima, onde é mostrada uma ampliação do gráfico da figura (2.13). Vamos considerar, para fins de ilustração, que há somente dois elétrons na amostra que são representados pelas curvas tracejadas azul (menor energia) e verde (maior energia). À $l = 0$, o estado $m = 0$ é aquele de menor energia, enquanto que os estados $m = -1$ e $m = +1$ são degenerados. À medida que l varia, os estados com $|m| = 1$ se separam de tal forma que o estado $m = +1$ vai sofrendo redução na energia, enquanto que o estado $m = 0$ passa a aumentar seu valor energético até se encontrarem no ponto $l = 0,5$. O elétron de menor energia inicialmente em $m = 0$ desejará permanecer sendo o menos energético e, para isso, deverá transitar para o estado $m = +1$ em $l = 0,5$. Em contrapartida, o outro elétron não terá escolha a não ser transitar para o estado $m = 0$ desocupado. Tal processo irá se repetir, com exceção do elétron menos energético, em intervalos de $0,5 h/e$. Além disso, a energia dos elétrons irá oscilar em intervalos de h/e .

Figura 2.15 – Oscilações Aharonov-Bohm em Sub-bandas Superiores



As curvas tracejadas (azul escuro e azul claro) representam o comportamento de elétrons distintos *A* e *B*, respectivamente. Fonte: Próprio autor.

Entretanto, a situação se torna mais complexa à medida que novas sub-bandas vão sendo ocupadas. Observe a figura (2.15): em tal faixa de energia, temos a presença de estados pertencentes as sub-banda $n = 0$ e $n = 1$. Dessa forma, os estados referentes às duas sub-bandas passam a se interceptar em diversos pontos, o que fará com que o número de transições de um determinado elétron se torne cada vez mais frequente e irregular. As linhas verticais pontilhadas em tal figura demarcam os pontos exatos onde os elétrons *A* e *B* transitam. Observe que, em um mesmo período de h/e , ocorrem ao todo seis transições ao passo que, no caso mostrado na Figura (2.14), ocorrem apenas duas. Posteriormente, veremos que determinadas propriedades do sistema como magnetização e corrente são profundamente afetadas pelas oscilações AB pois as mesmas são definidas em função de derivadas da energia em relação ao campo magnético e ao fluxo magnético, respectivamente.

2.2.6 Energia de Fermi e Espessura do Anel Quântico

A energia de Fermi para um dado B é o valor de energia mais alto que um estado do sistema de N_e elétrons pode alcançar no zero absoluto. Nesse regime de temperatura,

os elétrons vão ocupando os estados disponíveis de energia mais baixa até que toda a sua população tenha se acomodado. Desse modo, a extensão do espectro para o número quântico angular m ficará restrito, em cada sub-banda, ao valor da energia de Fermi.

Definimos a **espessura do anel quântico** como sendo a ‘região classicamente acessível’ de um elétron no potencial de Tan-Inkson (2.11) para uma dada Energia de Fermi E_f . Dessa forma, tal região será determinada pela solução da equação

$$E_f = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.64)$$

$$a_2 r^4 - (E_f + V_0) r^2 + a_1 = 0 \quad (2.65)$$

que pode ser reescrita como uma equação do segundo grau, fornecendo como soluções o **raio externo** r_+ e o **raio interno** r_- do anel (ver novamente Figura 2.8):

$$r_{\pm} = \left(\frac{E_f + V_0 \pm \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0}}{2a_2} \right)^{1/2}, \quad (2.66)$$

de modo que a espessura do anel Δr seja matematicamente definida como

$$\Delta r = r_+ - r_- \quad (2.67)$$

Substituindo as soluções (2.66) na definição anterior,

$$r_+ - r_- = \left(\frac{E_f + V_0 + \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0}}{2a_2} \right)^{1/2} - \left(\frac{E_f + V_0 - \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0}}{2a_2} \right)^{1/2}. \quad (2.68)$$

Elevando ambos os membros ao quadrado, temos

$$\begin{aligned} (r_+ - r_-)^2 &= \frac{E_f + V_0}{a_2} - \frac{1}{a_2} \left[\left(E_f + V_0 + \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0} \right) \left(E_f + V_0 - \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0} \right) \right]^{1/2}, \\ &= \frac{E_f + V_0}{a_2} - \frac{1}{a_2} [(E_f + V_0)^2 - E_f^2 - 2E_f V_0]^{1/2} = \frac{E_f + V_0}{a_2} - \frac{V_0}{a_2} = \frac{E_f}{a_2}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

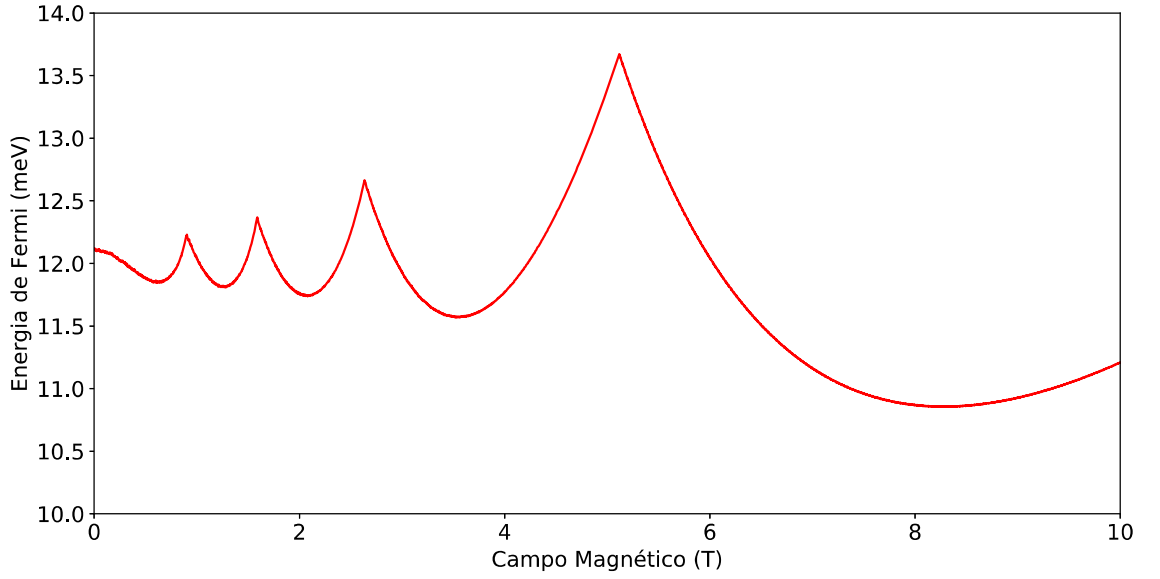
Lembrando da definição $\omega_0^2 = 8a_2/\mu$, a espessura do anel quântico será dada por

$$\Delta r = \sqrt{\frac{8E_f}{\mu\omega_0^2}}, \quad (2.70)$$

onde, com este resultado, podemos estimar a espessura do anel se obtivermos a energia de Fermi dado que já conhecemos μ e ω_0 .

Como discutido anteriormente, apenas a variação do campo magnético deve afetar a energia de Fermi do sistema. Então, usando os parâmetros do anel introduzidos anteriormente para uma amostra de GaAs contendo 1400 elétrons não-interagentes, obtemos numericamente o comportamento da Energia de Fermi em função do campo magnético apresentado na figura abaixo em acordo com [9]:

Figura 2.16 – **Energia de Fermi como Função do Campo Magnético**



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

Podemos observar que o campo magnético produz oscilações na energia de Fermi, como resultado da população e despopulação das sub-bandas a medida que elas alteram sua forma como mostrado anteriormente na Figura 2.9. O surgimento dos quatro picos representa a despopulação completa das sub-bandas de $n = 4$ até $n = 1$ em sequência. Além disso, a espessura do anel quântico Δr costuma ser determinada na ausência do campo magnético. Assim, para $B = 0$, extraímos do gráfico acima que $E_f \approx 12.12$ meV, muito próximo ao obtido em [9].

Portanto, segundo (2.66), os raios internos e externos do anel são dados por

$$r_+ \approx 1427 \text{ nm} \quad r_- \approx 1278 \text{ nm} \quad (2.71)$$

e, consequentemente, a espessura do anel será

$$\Delta r \approx 149 \text{ nm}. \quad (2.72)$$

Tal resultado está de acordo com o esperado pois o raio médio do anel $r_0 = 1350 \text{ nm}$ está dentro desse intervalo e o raio interno está mais próximo do raio médio do que o raio externo devido a uma maior repulsão interna que ‘comprime’ ainda mais os elétrons. Tal comportamento da energia de Fermi apresentado na Figura 2.16 será determinante para as propriedades de magnetização e corrente persistente do sistema.

2.2.7 Magnetização

Existe uma definição alternativa para o termo **mesoscópico**: trata-se de um sistema pequeno demais para ser observado a olho nu, porém grande o suficiente para seja possível e necessário medir parâmetros termodinâmicos intensivos de forma a extrair informações de um sistema microscopicamente complexo. Tais parâmetros têm a propriedade de que seus valores se mantenham constantes do ponto de vista macroscópico independente da variação de parâmetros extensivos do sistema como volume, energia interna ou número de partículas, pois se tratam de médias globais aplicadas a um grande número de partículas. Exemplos de parâmetros termodinâmicos intensivos são a temperatura, pressão e potencial químico [27].

Em um sistema termodinâmico na presença de um campo magnético B , o parâmetro extensivo que caracteriza o comportamento magnético é o **momento de dipolo magnético total** ou **magnetização total** da amostra $\mathcal{M}$. Essa propriedade é muito importante, pois determina como o sistema responde a ação de um campo magnético. Entretanto, é mais simples controlar o campo magnético aplicado pelo fato do mesmo não variar em determinado ponto com o tamanho da amostra, sendo considerado um parâmetro termodinâmico intensivo que se relaciona à magnetização através da expressão [27]

$$B = \left(\frac{\partial U}{\partial \mathcal{M}} \right)_{S, V, N_e} \quad (2.73)$$

Dessa forma, na representação energética, temos

$$U = U(S, V, \mathcal{M}, N_e), \quad (2.74)$$

onde S representa a entropia total do sistema, V representa o volume total e N_e representa o número de elétrons.

Interessa-nos obter uma nova representação de energia que forneça a temperatura T e a intensidade do campo magnético do sistema B em lugar da entropia e da magnetização, respectivamente. Portanto, faz-se a transformação de Legendre para o potencial

termodinâmico

$$F(T, V, B, N_e) = U(S, V, \mathcal{M}, N) - TS - BM \quad (2.75)$$

conhecido como **energia livre de Helmholtz**. Dado que estamos trabalhando com o número de elétrons constante, diferenciando F obtemos:

$$dF = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right) dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right) dV + \left(\frac{\partial U}{\partial \mathcal{M}} \right) d\mathcal{M} - TdS - SdT - \mathcal{M}dB - Bd\mathcal{M}, \quad (2.76)$$

onde negligenciamos os subíndices nas derivadas parciais que denotariam a constância dos outros parâmetros. Assim,

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) dT + \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right) dV + \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right) dB = -PdV - SdT - \mathcal{M}dB \quad (2.77)$$

e obtemos as equações de estado

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,B}, \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{P,B} \quad \text{e} \quad \mathcal{M}(B) = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,V}. \quad (2.78)$$

A energia livre total F pode ser obtida a partir da soma das auto-energias dos estados de cada elétron do sistema

$$F = \sum_{n,m}^{N_e} E_{n,m}, \quad E_{n,m} \leq E_f, \quad (2.79)$$

de modo que tal soma deve estar limitada ao número N_e de estados com energia menor ou igual a energia de Fermi para determinado valor de campo magnético. De forma mais explícita,

$$\mathcal{M}(B) = \sum_{n,m}^{N_e} \mathcal{M}_{n,m} = - \sum_{n,m}^{N_e} \frac{\partial E_{n,m}}{\partial B} \quad E_{n,m} \leq E_f \quad (2.80)$$

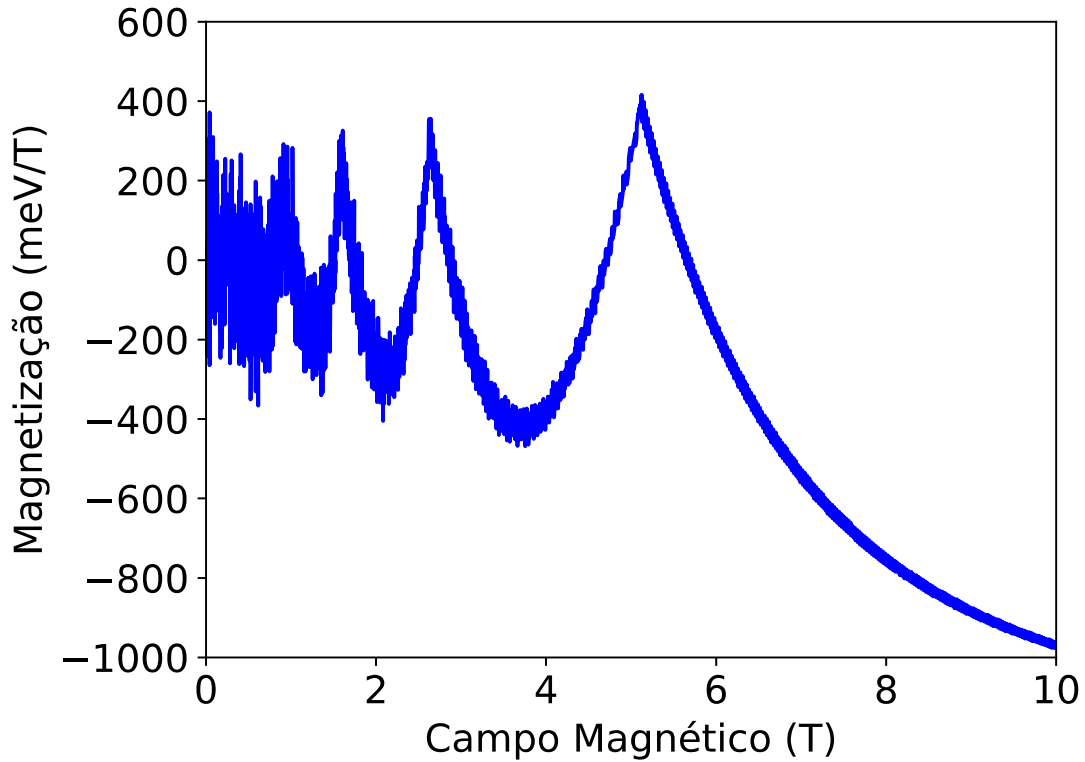
com, a partir de (2.43),

$$\mathcal{M}_{n,m} = - \frac{\partial E_{n,m}}{\partial B} = - \frac{\hbar e}{\mu} \left[\left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega} - \frac{m-l}{2} \right]. \quad (2.81)$$

A partir de (2.80) tomando $l = 0$, obtemos o comportamento para a magnetização total do sistema em função do campo magnético na Figura 2.17. É possível notar um padrão oscilatório global similar ao das oscilações na energia de Fermi. Tal similaridade não aparenta ser coincidência, pois, uma vez comparados os dois gráficos, percebe-se que os picos se situam na mesma região. De fato, é evidente que tais oscilações estão relacionadas à dinâmica de população e despopulação das sub-bandas. Na verdade, analisando

a Figura 2.17, notamos que há dois tipos principais de oscilação referente à magnetização: uma associada à dinâmica de alternância dos estados entre sub-bandas chamado de **oscilações Aharonov-Bohm (AB)** cujas amplitudes dominam para campos magnéticos fracos, pois em tal regime o número de sub-bandas ocupadas é máximo e outra, como já comentado, associada à despopulação das sub-bandas e dominante no regime de campos magnéticos fortes, denominada de **oscilações de Haas-van Alphen (dHvA)**. Note que as amplitudes das oscilações AB se tornam cada vez menores à medida que os picos vão sendo atingidos. A seguir, analisaremos tais regimes de forma mais detalhada:

Figura 2.17 – Magnetização do Sistema em Função do Campo Magnético

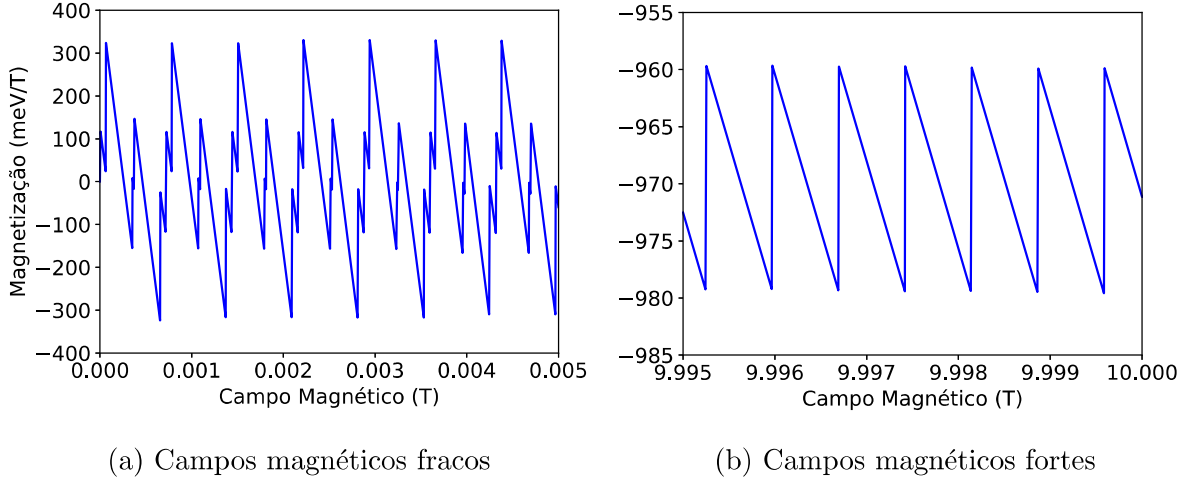


Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

Na Figura 2.18a, é apresentado o regime de campos magnéticos fracos. Em tal faixa, o número de sub-bandas ocupadas é máximo de modo que exista um conjunto de cinco valores possíveis para n em (2.81). Dessa forma, a magnetização total sofrerá intensas oscilações AB acompanhada de ruídos à medida que B varia, cujas amplitudes ultrapassam 600 meV/T. Por outro lado, no regime de campos magnéticos fortes mostrado na Figura 2.18b, as amplitudes das oscilações AB são fortemente suprimidas para aproximadamente

20 meV/T e se apresentam em um perfil livre de ‘ruídos’ conhecido como *sawtooth* ou *dente de serra*, o que se deve ao fato de que, neste caso, apenas a sub-banda fundamental ($n = 0$) está ocupada por conta das oscilações dHvA. Em ambos os regimes, o período de oscilação é de $\Delta B = \frac{\phi_0}{\pi r_0^2} \approx 0,000717 \text{ T}$ [9].

Figura 2.18 – **Regimes Extremos de Correntes Magnetização.**



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23 \text{ meV}$ e $r_0 = 1350 \text{ nm}$. Fonte: Próprio autor.

2.2.8 Correntes Persistentes

Em 1911, o cientista holandês Kamerlingh Onnes observou que a resistividade elétrica de certos metais e ligas metálicas experimentava uma brusca redução quando tais amostras eram submetidas a temperaturas muito baixas (da ordem do Hélio líquido), o que acarretava no surgimento de correntes contínuas associadas à resistências muito próximas de zero. Esse efeito ficou conhecido como **supercondutividade** e as correntes características de tal regime, por sofrerem baixa atenuação dissipativa, poderiam se manter por até 100 mil anos, sendo assim denominadas por **correntes persistentes** [22]. Entretanto, mesmo a temperaturas diferentes de zero, foi previsto por Büttiker, Imry e Landauer em 1983 [28, 29] e evidenciado experimentalmente por Levy et al. em 1990 [30] e Chandrasekhar et al. em 1991 [31] a presença de correntes persistentes em anéis mesoscópicos metálicos não supercondutores como os cobre (Cu) e de ouro (Au) quando sujeitos a fluxos magnéticos. Posteriormente em 1993, Maily et al. [7] realizaram o primeiro experimento deste tipo envolvendo anéis mesoscópicos semicondutores, onde se utilizou a heterojunção GaAs/GaAlAs à temperatura de 15 mK, obtendo-se uma amplitude de corrente igual a

$4 \pm 2 \text{ nA}$.

Nosso objetivo é, então, determinar a magnitude e o comportamento das correntes persistentes em um anel quântico de GaAs submetido a um campo magnético uniforme perpendicular ao plano do anel e a um fluxo Aharonov-Bohm que passa através do centro do anel. Podemos relacionar o campo elétrico induzido $\mathbf{E}$ na superfície com o campo magnético total no anel $\mathbf{B}_{\text{total}}$ através da forma diferencial da Lei de Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}_{\text{total}}}{\partial t}. \quad (2.82)$$

Integrando ambos os lados da equação através da área $\mathcal{S}$ delimitada pelo anel de contorno $\mathcal{C}$ e usando o Teorema de Stokes,

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{S}} \mathbf{B}_{\text{total}} \cdot d\mathbf{S} = -\frac{\partial \Phi_{\text{total}}}{\partial t}, \quad (2.83)$$

onde $\Phi_{\text{total}} = \Phi_M + \Phi_{AB}$ corresponde soma do fluxo devido ao campo magnético constante Φ_M e ao fluxo Aharonov-Bohm Φ_{AB} . Como Φ_M é constante, então

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\partial \Phi_{AB}}{\partial t}. \quad (2.84)$$

Se particularmente considerarmos o contorno $\mathcal{C}$ como sendo o anel unidimensional de raio r_0 , podemos identificar

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{2\pi r_0} \frac{\partial \Phi_{AB}}{\partial t} \hat{\varphi}. \quad (2.85)$$

Dessa forma, a força resultante agindo em um portador de carga (sentido convencional de corrente) será

$$\mathbf{F} = -\frac{e}{2\pi r_0} \frac{\partial \Phi_{AB}}{\partial t} \hat{\varphi}. \quad (2.86)$$

Uma variação da energia cinética do portador de carga será igual ao trabalho realizado pela força $\mathbf{F}$ em um deslocamento $\Delta \mathbf{l}$ ao longo do anel. Assim,

$$dE = dW = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{e}{2\pi r_0} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dl = -\frac{e}{2\pi r_0} \left(\frac{dl}{dt} \right) d\Phi = -\frac{ev}{2\pi r_0} d\Phi. \quad (2.87)$$

Identificando $\lambda = \frac{e}{2\pi r_0}$ como uma densidade linear de carga,

$$I = \lambda v = -\left(\frac{\partial E}{\partial \Phi} \right). \quad (2.88)$$

Levando-se em conta a variação do fluxo em l a partir da relação $\Phi = \phi_0 l$ com $\phi_0 = h/e$ sendo o quantum de fluxo, obtemos a relação de Byers-Yang[¶] para a corrente associada a um estado eletrônico ocupado:

$$I_{n,m} = -\frac{1}{\phi_0} \frac{\partial E_{n,m}}{\partial l}. \quad (2.89)$$

Com o auxílio da expressão para as auto-energias em (2.43), determinamos explicitamente que

$$I_{n,m} = \frac{e\omega}{4\pi} \left(\frac{m-l}{M} - \frac{\omega_c}{\omega} \right). \quad (2.90)$$

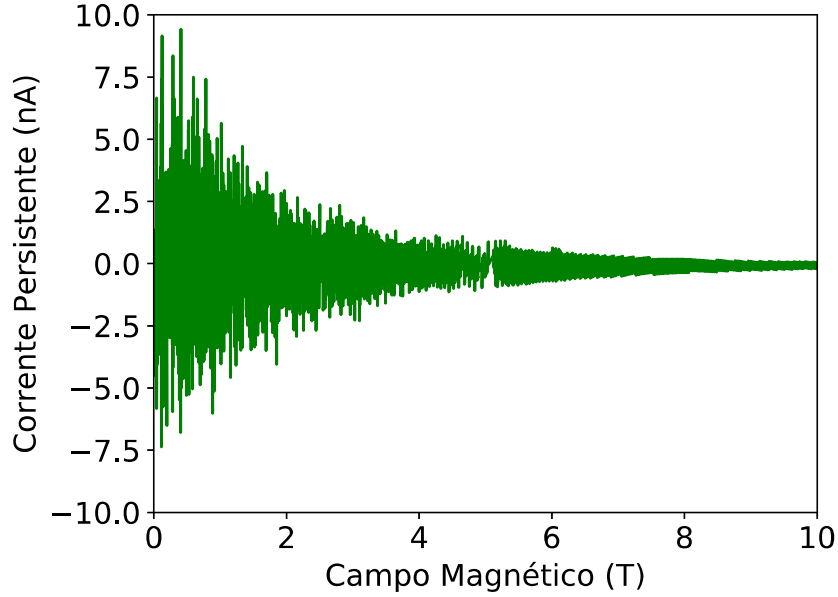
A partir do eletromagnetismo clássico, sabe-se que existe uma relação direta de proporcionalidade entre a corrente I que passa através de uma espira circular de raio r e seu correspondente momento de dipolo magnético $\mathcal{M}$ dada por $\mathcal{M} = \pi r^2 I$. Desse modo, comparando o último resultado com a magnetização por estado (2.81), concluímos que essas duas quantidades estão relacionadas da forma

$$\mathcal{M}_{n,m} = \pi r_m^2 I_{n,m} - \frac{e\hbar}{\mu} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega}, \quad (2.91)$$

onde r_m é o raio médio de estado definido anteriormente em (2.62). Percebe-se que tal proporcionalidade direta é quebrada pela existência de um termo diamagnético extra em relação ao resultado clássico resultante da resposta do sistema à penetração do campo magnético uniforme cuja influência desaparece quando $\omega_c \ll \omega_0$. Além disso, a partir de tal expressão, podemos esperar que o comportamento da magnetização e corrente sejam semelhantes.

[¶]Uma belíssima demonstração deste resultado, onde é feita uma analogia entre o gráfico da Figura 2.14 com a estrutura de banda de um cristal circular unidimensional representada no **esquema de zonas periódico** pode ser consultada na referência [32].

Figura 2.19 – Corrente Persistente no Anel em Função do Campo Magnético



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

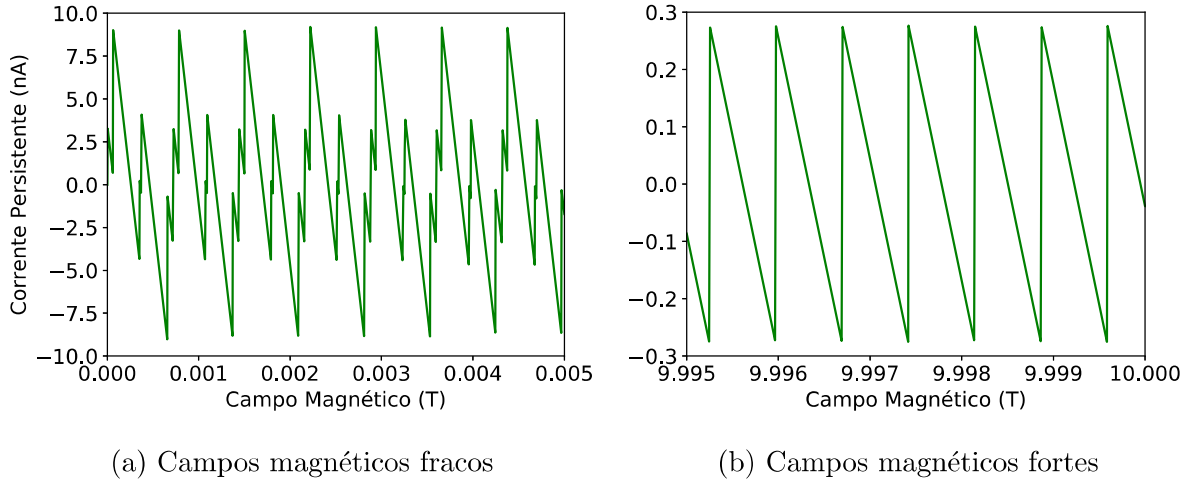
A corrente persistente resultante no anel será dada pela soma das correntes associadas a cada um dos estados $\psi_{n,m}$ ocupados, ou seja,

$$I = \sum_{n,m}^{N_e} I_{n,m}, \quad E_{n,m} \leq E_f. \quad (2.92)$$

Em função do campo magnético uniforme aplicado perpendicularmente ao anel, obtemos o perfil gráfico da corrente persistente total através de (2.92) considerando $l = 0$ (Figura 2.19). Novamente, identificamos um comportamento caracterizado por fortes oscilações AB acompanhada de ruídos para campos magnéticos fracos. Em contrapartida, tais oscilações se tornam cada vez mais fracas à medida que B aumenta como resultado da despopulação das sub-bandas. Apesar disso, não é possível identificarmos oscilações do tipo dHvA assim como observado para a magnetização.

Na figura abaixo, apresentamos o comportamento da corrente nos regimes extremos de campo magnético, onde é possível notar, como previsto, um comportamento similar ao da magnetização.

Figura 2.20 – **Regimes Extremos de Correntes Persistentes.**



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

2.3 Defeitos em Matéria Condensada: Disclinação

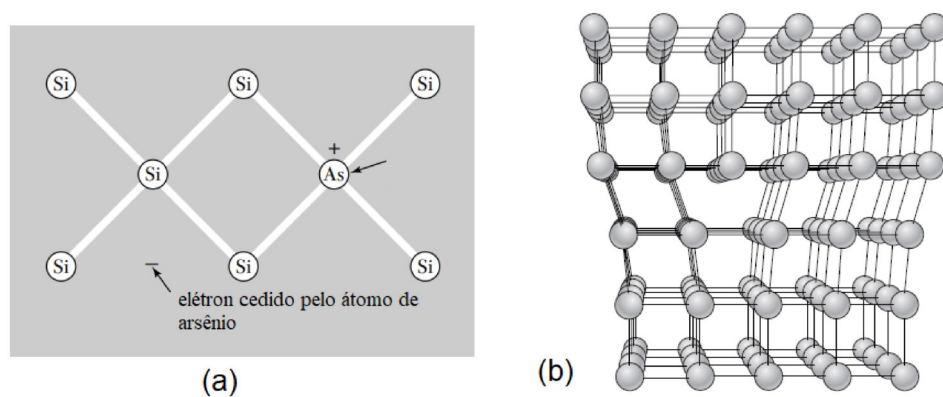
Por definição, os cristais são sólidos formados por átomos ou moléculas que se ligam para constituir uma estrutura periódica e bem definida que recebe o nome de **rede cristalina**, sendo que tais redes podem vir a receber variadas classificações a depender do padrão estrutural apresentado. Alguns exemplos de redes bidimensionais são as redes quadrada, retangular centrada e hexagonal. Para o caso tridimensional, temos a rede cúbica simples, cúbica de corpo centrado, cúbica de faces centradas, hexagonal compacta, entre outras variações decorrentes de suas combinações, como são os casos da estrutura do diamante e da estrutura de blenda [22].

Entretanto, há de se mencionar que, na natureza, os cristais nunca são perfeitos. Em vez disso, apresentam irregularidades limitadas a frações praticamente desprezíveis de uma determinada amostra, de tal forma que a estrutura periódica característica do cristal ainda se mantenha globalmente perceptível. Um exemplo muito comum de defeito em cristais são as **impurezas**, no qual um átomo que não faz parte da estrutura cristalina original pode ocupar tanto regiões interatômicas quanto a posição de um átomo da rede. O cristal macroscópico mais puro já produzido se trata de uma amostra feita de germânio cuja densidade de impurezas se situava em torno de 10^{10} cm^{-3} , o que equivale a menos de uma impureza a cada trilhão de átomos [33]! Devido às impurezas envolverem apenas regiões da ordem de um átomo, são classificadas como defeitos **pontuais**. Apesar disso,

os defeitos pontuais em cristais são responsáveis por muitas de suas propriedades ópticas, mecânicas e de condução [33]; a condutividade elétrica em semicondutores, por exemplo, pode ser aumentada substancialmente com a inserção de impurezas [22].

A **deslocação** é outro tipo de defeito que ocorre quando um semi-plano cristalino é inserido ou removido da amostra, gerando deformações na estrutura como se pode observar na Figura 2.21. Tal defeito é responsável por tornar uma amostra mecanicamente mais resistente [33] e é classificado como defeito de **linha** por envolver fileiras de átomos.

Figura 2.21 – **Ilustração dos Defeitos de Impureza e Deslocação em Cristais.**

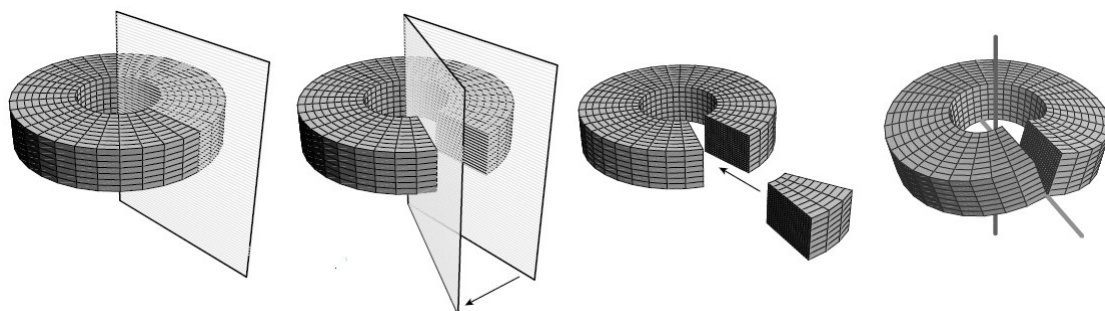


(a) Impureza: átomo de arsênio inserido em uma rede bidimensional quadrada composta por átomos de silício. (b) Deslocação: semi-plano cristalino inferior retirado de uma rede cúbica simples. Fonte: Referência [22].

Neste trabalho, temos por objetivo investigar o comportamento das propriedades eletrônicas, da magnetização e das correntes persistentes em um anel mesoscópico similar ao discutido na seção anterior, mas que desta vez apresente geometria cônica. Por sua vez, tal geometria está intimamente relacionada a um outro defeito de linha em matéria condensada: a **disclinação**, que pode ser obtida quando se retira uma determinada seção de uma amostra e, logo em seguida, põe-se as bordas separadas resultantes a se unirem, gerando uma deformação que se assemelha a um perfil cônico (Figura 2.22). Esse procedimento é conhecido na literatura como **processo de Volterra** [34].

O defeito de disclinação está presente em diversas aplicações em Física da Matéria Condensada, principalmente quando se trata de superfícies com espessura da ordem de átomos [35, 36]. Na Figura 2.23a, temos uma folha de **grafeno** – uma rede cristalina hexagonal com a espessura de um átomo na qual se encontram átomos de carbono em seus vértices – da qual é retirada uma seção angular. Quando as bordas separadas são unidas,

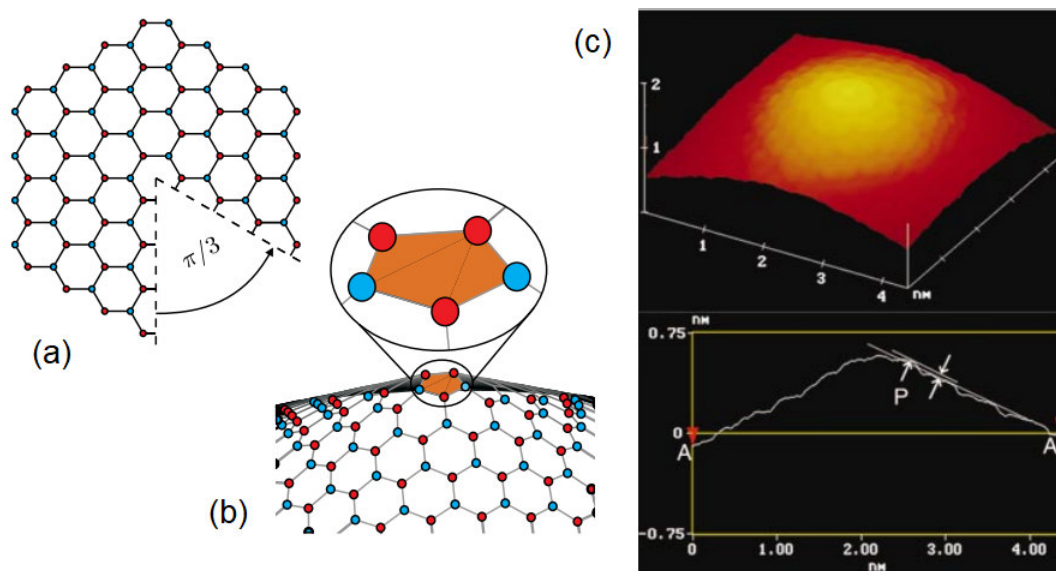
Figura 2.22 – Processo de Volterra.



Fonte: Referência [34].

pode-se observar que, além do surgimento de uma protuberância com perfil cônico já esperada, o hexágono central dá lugar a um pentágono no cume da superfície cônica (Figura 2.23b), fazendo com que a simetria rotacional de 60° seja quebrada. Na Figura 2.23c, é apresentada, na parte superior, a imagem obtida por **microscopia de tunelamento por varredura (STM)** da deformação causada em uma rede carbônica hexagonal que apresenta uma única cadeia cíclica pentagonal em seu cume, enquanto que na parte inferior se tem um recorte transversal da amostra que evidencia a geometria cônica induzida.

Figura 2.23 – Disclinação em Redes Carbônicas Hexagonais.



(a) Remoção de seção angular e união das bordas resultantes de acordo com o processo de Volterra. (b) Ilustração da deformação cônica gerada. (c) Imagem obtida por STM da disclinação em uma rede carbônica hexagonal. Fonte: (a) e (b), referência [35]; (c) referência [36].

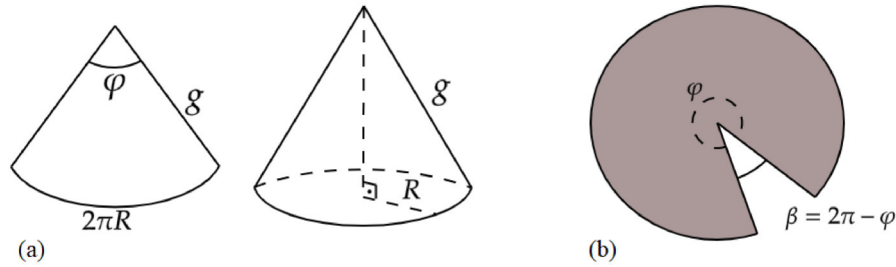
Visando incluir a disclinação no sistema via equação de Schrödinger, devemos ser

capazes de descrever geometricamente o defeito. Por conseguinte, considere a definição geométrica do cone: o cone é o resultado da união de dois lados de uma seção circular de ângulo φ e raio g conhecido como a **geratriz** do cone. Realizando tal procedimento, é fácil perceber que um cone com raio de base $R = \frac{g\varphi}{2\pi}$ será gerado (Figura 2.24a). Agora, considere um círculo de raio g do qual uma pequena seção circular de ângulo $\beta = 2\pi - \varphi$ é removida tal como ilustrado na Figura 2.24b. Quanto maior for a seção de ângulo β , mais ‘agudo’ será o cone formado, como podemos ver ao calcularmos o raio R da base em função do ângulo β e da geratriz g :

$$R = \frac{g\varphi}{2\pi} = \frac{g(2\pi - \beta)}{2\pi} = g(1 - \beta'), \quad (2.93)$$

onde $\beta' = \frac{\beta}{2\pi} \in [0, 1]$.

Figura 2.24 – Descrição Geométrica do Defeito Cônico



Fonte: Próprio autor.

Em outras palavras, quanto mais próximo o parâmetro β' estiver de zero, mais R estará próximo de g , o que significa que o defeito é pequeno e praticamente não há deformação (disco de raio $\approx g$). Por outro lado, quanto mais próximo o parâmetro β' estiver de 1, mais R estará próximo de zero, o que significa um cone mais agudo e, portanto, a deformação é mais intensa. Logo, vemos que β' é um parâmetro que mede diretamente o defeito. Entretanto, por convenção, utiliza-se o parâmetro $\alpha = 1 - \beta' \equiv \frac{\varphi}{2\pi}$ para descrever o defeito de modo que $\alpha = 1$ passa a representar uma situação onde não há defeito e $\alpha \approx 0$ representaria, portanto, um cone extremamente agudo.

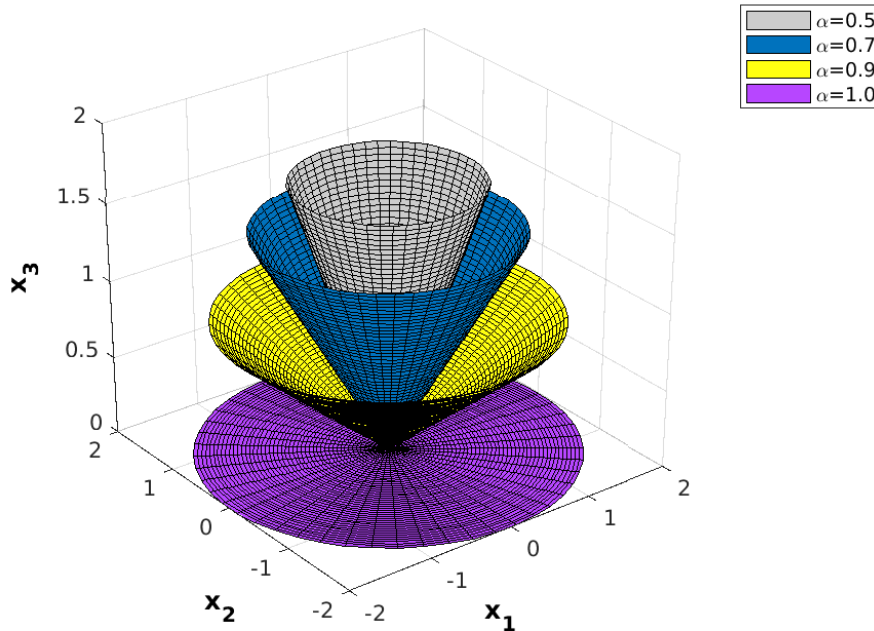
Como veremos no capítulo seguinte, podemos representar qualquer superfície por uma função vetorial paramétrica. A parametrização de uma superfície cônica associada ao defeito de disclinação α é dada por

$$\mathbf{x}(r, \theta) = (\alpha r \cos \theta, \alpha r \sin \theta, r\sqrt{1 - \alpha^2}), \quad r \in \mathbb{R}^+ \text{ e } 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad (2.94)$$

onde $0 < \alpha \leq 1$ ^{||}. O gráfico dessa parametrização será um cone com singularidade na origem. Na figura 2.25, esboçamos a superfície para diferentes valores de α , onde o caso $\alpha = 1$ leva a um disco de raio r (superfície plana). Note que o parâmetro r representa a distância entre um ponto na superfície à ponta do cone e não a distância a partir de seu eixo vertical.

Quando se trata de Geometria Diferencial, é mais útil e conveniente trabalharmos com a forma diferencial de uma superfície. Como será mostrado no próximo capítulo, precisamos apenas da função paramétrica (2.94) para determinarmos sua forma diferencial que, por sua vez, será obtida no Capítulo 4.

Figura 2.25 – **Representação gráfica das superfícies cônicas geradas por diferentes valores de disclinação α .**



$\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$ e $\mathbf{x}_3$ representam respectivamente os eixos x , y e z . Fonte: Próprio autor.

^{||} Apesar de não haver impedimento para $\alpha = 0$ em (2.94), tal caso levaria a uma linha unidimensional, o que não é o objeto de estudo deste trabalho

Capítulo 3

Teoria Elementar de Superfícies

Neste capítulo, o formalismo necessário para a inclusão dos efeitos de curvatura da superfície — um dos principais objetivos deste trabalho — será apresentado. Inicia-se com definições básicas sobre superfícies à luz da Geometria Diferencial. Em seguida, introduzimos as formas fundamentais de uma superfície e a intrínseca relação das mesmas com a curvatura normal. Nas seções seguintes, são obtidos os principais resultados do capítulo: as curvaturas média e gaussiana, as equações de Gauss-Weingarten e o teorema de Gauss-Bonnet.

3.1 Superfícies Parametrizadas

Uma superfície parametrizada é uma aplicação $\mathbf{x}$ num aberto $\mathbb{D} \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que

$$(u, v) \in \mathbb{D} \rightarrow \mathbf{x}(u, v) = (x_1(u, v), x_2(u, v), x_3(u, v)), \quad (3.1)$$

onde $x_1(u, v)$, $x_2(u, v)$ e $x_3(u, v)$ são chamadas de **funções coordenadas** de $\mathbf{x}$ (Figura 3.1).

Considere uma superfície M parametrizada por $\mathbf{x}(u, v)$ tal que $(u, v) \in \mathbb{D}$ seja diferenciável no ponto $(u_o, v_o) \in \mathbb{D}$. Fixado $u = u_o$, obtemos a função

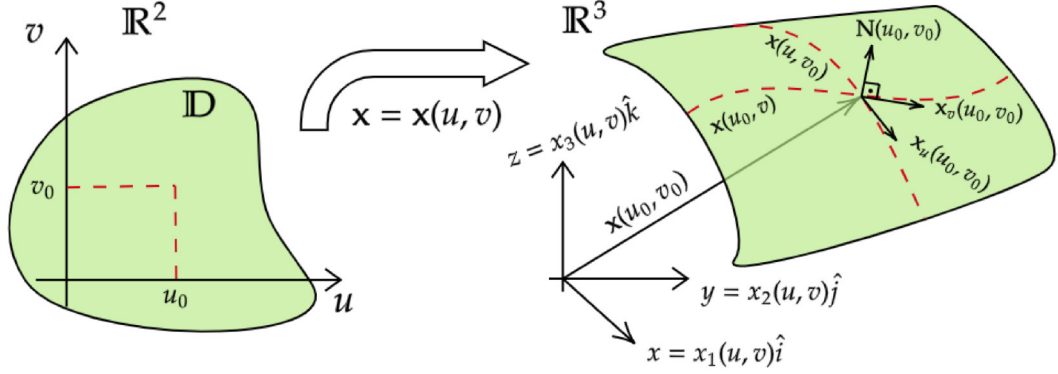
$$\mathbf{x}(u_o, v) = (x_1(u_o, v), x_2(u_o, v), x_3(u_o, v)). \quad (3.2)$$

Por outro lado, fixado $v = v_o$,

$$\mathbf{x}(u, v_o) = (x_1(u, v_o), x_2(u, v_o), x_3(u, v_o)). \quad (3.3)$$

Tais funções representam curvas na superfície M e recebem o nome de **curvas coordenadas**.

Figura 3.1 – **Representação Esquemática de uma Superfície Parametrizada**



À direita, as curvas tracejadas em vermelho correspondem às curvas coordenadas. Fonte: Próprio autor.

Se as seguintes derivadas

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}(u_o, v)}{\partial v} \right|_{v=v_o} = \mathbf{x}_v(u_o, v_o) = (x_{1v}(u_o, v_o), x_{2v}(u_o, v_o), x_{3v}(u_o, v_o)) \quad (3.4)$$

e

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}(u, v_o)}{\partial u} \right|_{u=u_o} = \mathbf{x}_u(u_o, v_o) = (x_{1u}(u_o, v_o), x_{2u}(u_o, v_o), x_{3u}(u_o, v_o)) \quad (3.5)$$

forem diferentes de zero, ambas definem **vetores tangentes** às curvas coordenadas no ponto $\mathbf{x}(u_o, v_o)$ e, conseqüentemente, um **plano tangente** à superfície orientado pelo **vetor normal** unitário $\mathbf{N}$ (ver Figura 3.1) definido como:

$$\mathbf{N}(u, v) = \frac{\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)}{\|\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)\|}, \quad (3.6)$$

onde a quantidade $\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)$ é chamada de **produto vetorial fundamental**. Se $\mathbf{N}(u, v)$ é diferente de zero em algum ponto $\mathbf{x}(u_o, v_o)$, a superfície é dita ser **regular** nesse ponto.

A correspondente área de uma superfície M parametrizada por $\mathbf{x}(u, v)$ é dada por

$$A(M) = \int \int_{\mathbb{D}} dA, \quad (3.7)$$

onde, como detalhado em [38],

$$dA = \|\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)\| du dv. \quad (3.8)$$

Exemplo: Uma superfície de esférica de raio $R > 0$ pode ser parametrizada pela aplicação

$$\mathbf{x}(u, v) = (R \sin u \cos v, R \sin u \sin v, R \cos u) \quad u \in \{0, \pi\} \quad \text{e} \quad v \in \{0, 2\pi\}. \quad (3.9)$$

Então,

$$\begin{cases} \mathbf{x}_u(u, v) = (R \cos u \cos v, R \cos u \sin v, -R \sin u), \\ \mathbf{x}_v(u, v) = (-R \sin u \sin v, R \sin u \cos v, 0). \end{cases} \quad (3.10)$$

Calculando $\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)$,

$$\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v) = R^2 (\sin^2 u \cos v, \sin^2 u \sin v, \sin u \cos u), \quad (3.11)$$

de onde se pode concluir que $\|\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)\| = R^2 \sin u$. Dessa forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(u, v) &= \frac{\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)}{\|\mathbf{x}_u(u, v) \times \mathbf{x}_v(u, v)\|} = \frac{R^2 (\sin^2 u \cos v, \sin^2 u \sin v, \sin u \cos u)}{R^2 \sin u}, \\ \mathbf{N}(u, v) &= (\sin u \cos v, \sin u \sin v, \cos u) \end{aligned} \quad (3.12)$$

que é regular em todos os pontos de seu domínio e, portanto, dizemos que a superfície é regular. Além disso, segundo (3.8), a área da superfície será

$$A(M) = R^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin u \, du \, dv = 4\pi R^2. \quad (3.13)$$

que reconhecemos usualmente como a área de uma superfície esférica de raio R .

3.2 Primeira Forma Fundamental

As **formas fundamentais** são formas quadráticas diferenciais que carregam, junto de si, informações importantes que determinam a geometria de uma superfície [39].

Considere uma superfície parametrizada por u e v . Uma relação entre tais parâmetros da forma $\varphi(u, v) = 0$ determina uma curva sobre a superfície. Note por exemplo que $u = f(v)$ satisfaz tal equação com $\varphi(u, v) = u - f(v)$. De fato, para uma superfície esférica com parametrização dada por (3.9), obteriam-se curvas sobre a mesma pois $\|\mathbf{x}(u, v)\| = R\sqrt{\cos^2 f(v) + \sin^2 f(v)} = R$, qualquer seja a função $f(v)$. Tal curva pode ser dada em sua forma paramétrica em $t \in \mathbb{R}$, isto é, uma vez que $u = u(t)$ e $v = v(t)$, $\mathbf{x}(u, v) \rightarrow \mathbf{x}(u(t), v(t))$. Assim, o vetor $\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ tangente à curva em um ponto P da superfície pode ser escrito como

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{du} \frac{du}{dt} + \frac{d\mathbf{x}}{dv} \frac{dv}{dt} = \mathbf{x}_u \dot{u} + \mathbf{x}_v \dot{v}, \quad (3.14)$$

onde, uma vez que é tangente à curva, é também tangente à superfície. Na forma independente explicitamente do parâmetro,

$$d\mathbf{x} = \mathbf{x}_u du + \mathbf{x}_v dv. \quad (3.15)$$

Desse modo, a distância entre dois pontos distintos na curva pode ser determinada pelo elemento de distância ds a partir de

$$ds^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = (\mathbf{x}_u du + \mathbf{x}_v dv) \cdot (\mathbf{x}_u du + \mathbf{x}_v dv) = Edu^2 + 2F dudv + Gdv^2, \quad (3.16)$$

onde

$$E = \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u, \quad F = \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_v, \quad G = \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v. \quad (3.17)$$

A equação (3.16) é chamada de **primeira forma fundamental** da superfície. Portanto, a distância s entre os dois pontos na curva (e na superfície) será

$$s = \int_{t_0}^t \sqrt{E \left(\frac{du}{dt'} \right)^2 + 2F \frac{du}{dt'} \frac{dv}{dt'} + G \left(\frac{dv}{dt'} \right)^2} dt'. \quad (3.18)$$

Uma vez que ds é uma medida de distância, ds^2 será sempre positivo. Consequentemente, se reescrevermos (3.16) como

$$ds^2 = \frac{1}{E} (Edu + Fdv)^2 + \frac{(EG - F^2)}{E} dv^2, \quad (3.19)$$

concluimos que, sendo $E = \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u > 0$,

$$EG - F^2 > 0. \quad (3.20)$$

Além disso, usando a identidade vetorial $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{A})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^2$,

$$\|\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v\|^2 = (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v) \cdot (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v) = (\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) - (\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_v)^2 = EG - F^2. \quad (3.21)$$

Portanto, (3.8) se torna

$$dM = \sqrt{EG - F^2} dudv. \quad (3.22)$$

Agora, considere duas curvas distintas que passam pelo mesmo ponto P em uma superfície. As direções de cada curva no ponto são determinadas pela direção dos seus respectivos vetores tangentes. Em outras palavras, é possível representá-las por

$$d\mathbf{x} = \mathbf{x}_u du + \mathbf{x}_v dv, \quad \text{e} \quad \delta\mathbf{x} = \mathbf{x}_u \delta u + \mathbf{x}_v \delta v, \quad (3.23)$$

o que permite calcular o ângulo α entre tais direções:

$$\|d\mathbf{x}\| \|\delta\mathbf{x}\| \cos \alpha = d\mathbf{x} \cdot \delta\mathbf{x} = (\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u) du \delta u + (\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_v)(du \delta v + dv \delta u) + (\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) dv \delta v, \quad (3.24)$$

$$\|d\mathbf{x}\| \|\delta\mathbf{x}\| \cos \alpha = Edu \delta u + F(du \delta v + dv \delta u) + Gdv \delta v. \quad (3.25)$$

Do resultado anterior, obtêm-se a condição de ortogonalidade entre duas curvas em um ponto ao fazer $\alpha = \pi/2$. Assim,

$$Edu \delta u + F(du \delta v + dv \delta u) + Gdv \delta v = 0. \quad (3.26)$$

Para o caso específico entre duas curvas coordenadas, atribui-se $u = \text{constante}$ ($du = 0$ e $dv \neq 0$) para uma e $v = \text{constante}$ ($\delta u \neq 0$ e $\delta v = 0$) para outra, o que conduz às seguintes conclusões:

- Duas curvas coordenadas são **ortogonais** se $F = 0$.
- O cosseno e o seno do ângulo entre duas curvas coordenadas são, segundo (3.16) e (3.25),

$$\cos \alpha = \frac{F dv \delta u}{\sqrt{G} dv^2 \sqrt{E} \delta u^2} = \frac{F}{\sqrt{EG}} \quad (3.27)$$

e, pela relação fundamental da trigonometria,

$$\sin \alpha = \frac{\sqrt{EG - F^2}}{\sqrt{EG}}. \quad (3.28)$$

Exemplo: Em uma superfície esférica de raio $R > 0$ tal como definido em (3.9), $x = R \sin u \cos v$, $y = R \sin u \sin v$ e $z = R \cos u$. Dessa forma,

$$\begin{cases} dx = R \cos u \cos v du - R \sin u \sin v dv, \\ dy = R \cos u \sin v du + R \sin u \cos v dv, \\ dz = -R \sin u du. \end{cases} \quad (3.29)$$

Logo,

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = R^2 du^2 + R^2 \sin^2 u dv^2. \quad (3.30)$$

Vemos que não há termos mistos da forma $dudv$. Portanto, $F = 0$ e as curvas coordenadas (paralelos e meridianos) são ortogonais.

3.3 Segunda Forma Fundamental

Na seção anterior, foi introduzida a primeira de duas formas quadráticas fundamentais, responsáveis por determinar as propriedades geométricas de uma superfície. A primeira forma fundamental era, certamente, familiar ao leitor que já teve algum contato com cálculo tensorial.

A segunda de tais formas quadráticas parte da ideia de analisar o vetor de curvatura em determinado ponto de uma curva C pertencente à superfície. Lembrando da definição do vetor de curvatura $\mathbf{k}$ em uma curva C já parametrizada pelo comprimento de arco s ,

$$\mathbf{k} = \frac{d\mathbf{t}}{ds} \quad (3.31)$$

e deve ser ortogonal a cada ponto da curva com $\mathbf{t}$ sendo o vetor tangente unitário. Em muitos casos, tais como meridianos de uma superfície esférica ou circunferências de uma superfície cilíndrica, o vetor de curvatura é ortogonal tanto à curva quanto à superfície. Por outro lado, não se pode afirmar que $\mathbf{k}$ sempre será ortogonal à superfície na qual C faz parte haja vista as circunferências em uma superfície cônica. Desse modo, é necessário decompor o vetor de curvatura em uma componente normal à superfície $\mathbf{k}_N$ e em uma componente tangencial $\mathbf{k}_g$. Ou seja,

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_N + \mathbf{k}_g, \quad (3.32)$$

onde $\mathbf{k}_N = \kappa_N \mathbf{N}$ e κ_N é chamado de **curvatura normal**. A **curvatura geodésica** ou **tangencial** κ_g será abordada em uma seção posterior deste capítulo.

Usando o fato de que $\mathbf{N} \cdot \mathbf{t} = 0$,

$$\frac{d}{ds} (\mathbf{N} \cdot \mathbf{t}) = 0 \rightarrow \frac{d\mathbf{t}}{ds} \cdot \mathbf{N} = -\mathbf{t} \cdot \frac{d\mathbf{N}}{ds} = -\frac{d\mathbf{x}}{ds} \cdot \frac{d\mathbf{N}}{ds}. \quad (3.33)$$

De (3.31),

$$\kappa_N = \frac{d\mathbf{t}}{ds} \cdot \mathbf{N} = -\frac{d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{N}}{d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}}. \quad (3.34)$$

Uma vez que $\mathbf{N}$ e $\mathbf{x}$ são funções dos parâmetros u e v da superfície que, por sua vez, também dependem da curva C , de (3.16),

$$\kappa_N = -\frac{(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_u) du^2 + (\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v + \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u) dudv + (\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_v) dv^2}{Edu^2 + 2Fdudv + Gdv^2}, \quad (3.35)$$

$$\kappa_N = \frac{edu^2 + 2fdudv + gdv^2}{Edu^2 + 2Fdudv + Gdv^2}, \quad (3.36)$$

onde

$$e = -\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_u, \quad 2f = -(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v + \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u) \quad \text{e} \quad g = -\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_v. \quad (3.37)$$

A nova forma quadrática no numerador de (3.36) é chamada de **segunda forma fundamental**. Uma vez que $\mathbf{x}(u, v)$ é contínua e diferenciável, $\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v = \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u$. Portanto,

$$f = -\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v = -\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u. \quad (3.38)$$

Os coeficientes e , f e g são chamados de **coeficientes da segunda forma fundamental** e, ocasionalmente, podem vir a ser designados por elementos h_{ij} de uma matriz quadrada de ordem dois tal que

$$h_{11} = -\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_u, \quad h_{12} = h_{21} = -\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v = -\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u \quad \text{e} \quad h_{22} = -\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_v \quad (3.39)$$

Ainda é possível reescrever esses termos de outras duas formas: uma delas é considerar o fato de que $\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N} = 0$ e $\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N} = 0$. Dessa forma,

$$e = \mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{N}, \quad f = \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{N} \quad \text{e} \quad g = \mathbf{x}_{vv} \cdot \mathbf{N}. \quad (3.40)$$

A outra consiste apenas em aplicar a expressão (3.6) para $\mathbf{N}$ já adequada à primeira forma fundamental. Logo,

$$e = \frac{\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v}{\sqrt{EG - F^2}}, \quad f = \frac{\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v}{\sqrt{EG - F^2}} \quad \text{e} \quad g = \frac{\mathbf{x}_{vv} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v}{\sqrt{EG - F^2}}. \quad (3.41)$$

3.4 Curvaturas Média e Gaussiana

Faz sentido que, em geral, curvas com direções distintas possuem valores de curvatura normal diferentes. Então, é interessante perguntar: em qual direção, a curvatura normal atinge seus extremos (máximo ou mínimo)? E quais os respectivos valores da curvatura em tais direções?

Na discussão da equação (3.26), pôde-se perceber que a relação entre u e v determina direções específicas no ponto em que duas curvas se encontram. Dessa forma, atribui-se uma direção particular à quantidade $\lambda = dv/du$. Reescrevendo κ_N em função de λ ,

$$\kappa_N = \frac{e + 2f\lambda + g\lambda^2}{E + 2F\lambda + G\lambda^2} = \frac{(e + f\lambda) + \lambda(f + g\lambda)}{(E + F\lambda) + \lambda(F + G\lambda)} \quad (3.42)$$

As direções correspondentes às curvaturas máxima e mínima serão obtidas através da equação $\frac{d\kappa_N}{d\lambda} = 0$, ou mais explicitamente,

$$(f + g\lambda)(E + 2F\lambda + G\lambda^2) = (e + 2f\lambda + g\lambda^2)(F + G\lambda). \quad (3.43)$$

Então,

$$\kappa_N = \frac{(e + f\lambda) + \lambda(f + g\lambda)}{(E + F\lambda) + \lambda(F + G\lambda)} = \frac{(f + g\lambda)}{(F + G\lambda)} \quad (3.44)$$

Manipulando algebricamente a equação anterior,

$$\kappa_N = \frac{(f + g\lambda)}{(F + G\lambda)} = \frac{(e + f\lambda)}{(E + F\lambda)}, \quad (3.45)$$

de onde é possível obter o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} (G\kappa_N - g)\lambda + (F\kappa_N - f) = 0, \\ (F\kappa_N - f)\lambda + (E\kappa_N - e) = 0, \end{cases} \quad (3.46)$$

que serão satisfeitas simultaneamente se, e somente se,

$$\det \begin{pmatrix} G\kappa_N - g & F\kappa_N - f \\ F\kappa_N - f & E\kappa_N - e \end{pmatrix} = (G\kappa_N - g)(E\kappa_N - e) - (F\kappa_N - f)^2 = 0, \quad (3.47)$$

$$(EG - F^2)\kappa_N^2 - (Eg - 2Ff + eG)\kappa_N + (eg - f^2) = 0. \quad (3.48)$$

A equação do segundo grau encontrada acima deverá fornecer duas raízes κ_1 e κ_2 que irão corresponder às curvaturas extremas, também chamadas de **curvaturas principais**, enquanto que as direções λ associadas a tais valores de curvatura recebem o nome de **direções principais**. Utilizando as conhecidas relações envolvendo a soma e o produto de duas raízes, define-se

$$M = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2) = \frac{Eg - 2Ff + Ge}{2(EG - F^2)} \quad (3.49)$$

como a **curvatura média** e

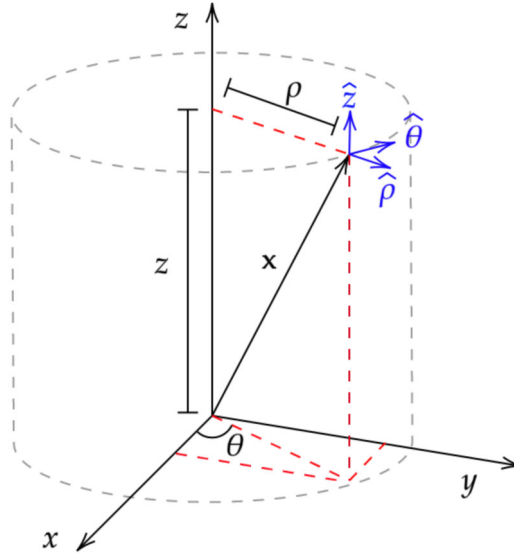
$$K = \kappa_1\kappa_2 = \frac{eg - f^2}{EG - F^2} \quad (3.50)$$

como a **curvatura gaussiana** ou **curvatura total**. A necessidade por se apresentar as duas últimas definições se deve ao fato de que serão essas curvaturas que estarão explicitamente presentes nos efeitos da curvatura de uma superfície na equação de Schrödinger.

3.5 Coordenadas Curvilíneas

Nesta seção, discutiremos algumas propriedades envolvendo sistemas de coordenadas curvilíneas. Abordaremos tais aspectos partindo do conceito de elemento de arco $|d\mathbf{x}| = ds$ que, preliminarmente, atribuiremos a ele apenas a significância de medir distâncias.

Figura 3.2 – Sistema de Coordenadas Cilíndricas



As seções da superfície do cilindro imaginário $r = \text{constante}$ (lateral), $\theta = \text{constante}$ (cortes transversais) e $z = \text{constante}$ (círculos) se intersectam em ângulos retos. Fonte: Próprio autor.

Para o sistema de coordenadas cartesianas x , y e z , ao qual temos maior familiaridade, é quase imediato concluir que um elemento infinitesimal de distância em uma dada trajetória pode ser obtido diretamente pelo teorema de Pitágoras, isto é,

$$ds^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (3.51)$$

Agora, se buscarmos determinar o elemento de distância em coordenadas cilíndricas, de acordo com a Figura 3.2,

$$\begin{cases} x = \rho \cos \theta; \\ y = \rho \sin \theta; \\ z = z. \end{cases} \quad (3.52)$$

Então,

$$\begin{cases} dx = \cos \theta d\rho - \rho \sin \theta d\theta; \\ dy = \sin \theta d\rho + \rho \cos \theta d\theta; \\ dz = dz. \end{cases} \quad (3.53)$$

Substituindo (3.53) em (3.51),

$$ds^2 = \cos^2 \theta d\rho^2 - \cancel{2\rho \sin \theta \cos \theta d\rho d\theta} + \rho^2 \sin^2 \theta d\theta^2 + \sin^2 \theta d\rho^2 + \cancel{2\rho \sin \theta \cos \theta d\rho d\theta} + \rho^2 \cos^2 \theta d\theta^2 + dz^2, \\ ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\theta^2 + dz^2. \quad (3.54)$$

Note que, tanto em (3.51) como em (3.54), não há produtos cruzados da forma $dx dy$ ou $d\rho d\theta$. Isso acontece porque, em particular, tais sistemas de coordenadas são **ortogonais**, ou seja, suas **superfícies coordenadas** ($r = \text{constante}$, $\theta = \text{constante}$ e $z = \text{constante}$) se intersectam em 90° (vide Figura 3.2). Entretanto, como a superfície coordenada $r = \text{constante}$ não é plana, esse sistema, assim como os sistemas de coordenadas esféricas e parabólicas, são classificados como **sistemas de coordenadas curvilíneas**.

Desse modo, podemos aferir que

$$d\mathbf{x} = d\rho \hat{\rho} + \rho d\theta \hat{\theta} + dz \hat{z}. \quad (3.55)$$

Os termos 1, ρ e 1 que acompanham as diferenciais e os vetores unitários em (3.55) são chamados de **fatores de escala**. Para o caso do sistema cartesiano, tais fatores devem ser 1, 1 e 1.

Frequentemente, é mais útil partir de $d\mathbf{x}$ na base do sistema coordenadas cartesianas, pois tais vetores unitários, neste caso, não mudam suas direções no espaço ponto a ponto. É fácil ver que os vetores unitários da Figura 3.2 não são fixos a medida que o vetor posição $\mathbf{x}$ varre o espaço. Assim, lançando mão de (3.53),

$$d\mathbf{x} = dx \hat{x} + dy \hat{y} + dz \hat{z}, \\ d\mathbf{x} = (\cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y}) d\rho + \rho (-\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y}) d\theta + dz \hat{z}. \quad (3.56)$$

Logo, comparando com (3.55),

$$\begin{cases} \hat{\rho} = \cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y} = \hat{e}_\rho; \\ \rho \hat{\theta} = \rho (-\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y}) = \hat{e}_\theta; \\ \hat{z} = \hat{e}_z; \end{cases} \quad (3.57)$$

onde os vetores $\hat{e}_\rho$, $\hat{e}_\theta$ e $\hat{e}_z$ são chamados de **vetores de base** e não são, necessariamente unitários. Tais vetores são úteis para que o elemento de deslocamento $d\mathbf{x}$ consiga ser compactado na forma

$$d\mathbf{x} = \sum_i^n dx^i \hat{e}_i \equiv dx^i \hat{e}_i, \quad (3.58)$$

onde introduzimos a notação tensorial da **soma de Einstein** no último membro da equação e os termos x^i se referem a coordenadas gerais. Portanto, a partir dessa definição, como x , y e z passam a ser funções das coordenadas generalizadas x^i ,

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= dx\hat{x} + dy\hat{y} + dz\hat{z} = d\mathbf{r} = \left(\frac{\partial x}{\partial x^i}\right) dx\hat{x} + \left(\frac{\partial y}{\partial x^i}\right) dy\hat{y} + \left(\frac{\partial z}{\partial x^i}\right) dz\hat{z}, \\ d\mathbf{x} &= dx^i \left(\frac{\partial x}{\partial x^i} \hat{x} + \frac{\partial y}{\partial x^i} \hat{y} + \frac{\partial z}{\partial x^i} \hat{z} \right) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x^i} dx^i. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Portanto, comparando (3.58) e (3.59)

$$\hat{e}_i = \left(\frac{\partial x}{\partial x^i} \hat{x} + \frac{\partial y}{\partial x^i} \hat{y} + \frac{\partial z}{\partial x^i} \hat{z} \right) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x^i}. \quad (3.60)$$

Assim, podemos definir, a partir de (3.51), (3.54) e (3.58),

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j, \quad (3.61)$$

onde

$$g_{ij} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x^j} = \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j \equiv \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

É chamado de **tensor métrico** do sistema de coordenadas. Em termos dos fatores de escala h_i ,

$$d\mathbf{x} = h_1 dx^1 \hat{x}_1 + h_2 dx^2 \hat{x}_2 + h_3 dx^3 \hat{x}_3. \quad (3.63)$$

Dessa forma,

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & h_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & h_3^2 \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

$$g_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ h_i^2 & i = j. \end{cases} \quad (3.65)$$

Portanto*,

$$\mathcal{G} = \det(g_{ij}) = (h_1 h_2 h_3)^2. \quad (3.66)$$

Da definições (3.16) (3.61), podemos concluir que os coeficientes da primeira forma fundamental são equivalentes aos coeficientes da matriz do tensor métrico. Note que, como são necessários apenas dois parâmetros para descrever uma superfície, o tensor métrico deve ser de segunda ordem. Desse modo,

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} E & F \\ F & G \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

o que nos leva a

$$\mathcal{G} \equiv \det(g_{ij}) = EG - F^2. \quad (3.68)$$

Analogamente, a partir das expressões (3.36) e (3.37), podemos escrever os coeficientes da segunda forma fundamental como elementos de uma matriz quadrada ou tensor de ordem dois.

$$h_{ij} = \begin{pmatrix} e & f \\ f & g \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

Portanto, com a ajuda de (3.39), podemos reescrever os resultados (3.48) e (3.49) para as curvaturas média e gaussiana, respectivamente, como:

$$M = \frac{g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}}{2g} \quad \text{e} \quad K = \frac{\det(h_{ij})}{2}. \quad (3.70)$$

3.6 Equações de Gauss-Weingarten

Definidas as formas fundamentais de uma superfície e discutida a conexão das mesmas com as propriedades geométricas, podemos ser compelidos a buscar por uma relação entre os coeficientes E , F e G da primeira forma fundamental e os coeficientes e , f e g da segunda forma fundamental.

*Excepcionalmente neste capítulo, optou-se por utilizar a notação $\mathcal{G}$ em lugar de g para designar o determinante da métrica com o objetivo de evitar confusão quanto ao coeficiente g da segunda forma fundamental. Infortunadamente, o uso da letra g para essas duas finalidades é uma convenção amplamente estabelecida e, portanto, fazer tal substituição casual se mostrou a escolha mais agradável.

Para tal fim, considere uma superfície sobre a qual se estabelece uma base composta pelos vetores tangentes $\mathbf{x}_u$, $\mathbf{x}_v$ e pelo vetor normal unitário $\mathbf{N}$. É importante ressaltar que $\mathbf{x}_u$ e $\mathbf{x}_v$ não são necessariamente ortogonais, fato que só ocorrerá quando $F = 0$. Por conseguinte, qualquer vetor pode ser expresso em termos desse triedro. Em particular,

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{uu} = \beta_1 \mathbf{x}_u + \beta_2 \mathbf{x}_v + \beta_3 \mathbf{N}, \\ \mathbf{x}_{uv} = \gamma_1 \mathbf{x}_u + \gamma_2 \mathbf{x}_v + \gamma_3 \mathbf{N}, \\ \mathbf{x}_{vv} = \eta_1 \mathbf{x}_u + \eta_2 \mathbf{x}_v + \eta_3 \mathbf{N}; \end{cases} \quad (3.71)$$

onde os coeficientes β_i , γ_i e η_i ainda precisam ser determinados.

Das definições (3.40),

$$e = \mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{N} = \beta_3, \quad f = \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{N} = \gamma_3 \quad \text{e} \quad g = \mathbf{x}_{vv} \cdot \mathbf{N} = \eta_3. \quad (3.72)$$

Além disso, lançando mão das definições dos coeficientes da primeira forma fundamental

$$\begin{aligned} \frac{E_u}{2} &= \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{uu}, & \frac{E_v}{2} &= \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{uv}, & F_u - \frac{E_v}{2} &= \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{uu}, \\ \frac{G_u}{2} &= \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{uv}, & \frac{G_v}{2} &= \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{vv} \quad \text{e} \quad F_v - \frac{E_u}{2} &= \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{vv}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Combinando os resultados (3.73) com as equações (3.71), obtemos o sistema linear a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{E_u}{2} &= \beta_1 E + \beta_2 F, & F_u - \frac{E_v}{2} &= \beta_1 F + \beta_2 G, & \frac{E_v}{2} &= \gamma_1 E + \gamma_2 F, \\ \frac{G_u}{2} &= \gamma_1 F + \gamma_2 G, & \frac{G_v}{2} &= \eta_1 F + \eta_2 G \quad \text{e} \quad F_v - \frac{G_u}{2} &= \eta_1 E + \eta_2 F. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Resolvendo-o para os coeficientes β_i , γ_i e η_i ,

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \Gamma_{11}^1 = \frac{GE_u - 2FF_u + FE_v}{2(EG - F^2)} \quad \text{e} \quad \beta_2 = \Gamma_{11}^2 = \frac{2EF_u - EE_v - FE_u}{2(EG - F^2)}, \\ \gamma_1 &= \Gamma_{12}^1 = \frac{GE_v - FG_u}{2(EG - F^2)} \quad \text{e} \quad \gamma_2 = \Gamma_{12}^2 = \frac{EG_u - FE_v}{2(EG - F^2)}, \\ \eta_1 &= \Gamma_{22}^1 = \frac{2GF_v - GG_u + FG_v}{2(EG - F^2)} \quad \text{e} \quad \eta_2 = \Gamma_{22}^2 = \frac{EG_v - 2FF_v - FG_u}{2(EG - F^2)}, \end{aligned} \quad (3.75)$$

onde as quantidades Γ_{jk}^i são conhecidas na literatura como os **símbolos de Christoffel do segundo tipo**, extremamente importantes no formalismo da Relatividade Geral.

Portanto, rescrevendo então as equações (3.71) uma vez munidos dos resultados (3.72) e dos símbolos de Christoffel obtidos acima,

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{uu} = \Gamma_{11}^1 \mathbf{x}_u + \Gamma_{11}^2 \mathbf{x}_v + e \mathbf{N}, \\ \mathbf{x}_{uv} = \Gamma_{12}^1 \mathbf{x}_u + \Gamma_{12}^2 \mathbf{x}_v + f \mathbf{N}, \\ \mathbf{x}_{vv} = \Gamma_{22}^1 \mathbf{x}_u + \Gamma_{22}^2 \mathbf{x}_v + g \mathbf{N}. \end{cases} \quad (3.76)$$

Tal conjunto recebe o nome de **equações de Gauss**, sendo tais relações de natureza diferencial e não algébrica. Todavia, dado que $\mathbf{x}_u$, $\mathbf{x}_v$ e $\mathbf{N}$ dependem de E , F e G , ao passo que $\mathbf{x}_{uu}$, $\mathbf{x}_{uv}$ e $\mathbf{x}_{vv}$ dependem de E , F , G , e , f e g , as equações de Gauss são capazes de relacionar os coeficientes das duas formas fundamentais.

Outro caminho para alcançar tal objetivo consiste em expressar os vetores $\mathbf{N}_u$ e $\mathbf{N}_v$ como combinação linear de $\mathbf{x}_u$ e $\mathbf{x}_v$, visto que os mesmos estão situados sobre o plano tangente. Dessa forma,

$$\begin{cases} \mathbf{N}_u = \alpha_{11}\mathbf{x}_u + \alpha_{12}\mathbf{x}_v, \\ \mathbf{N}_v = \alpha_{21}\mathbf{x}_u + \alpha_{22}\mathbf{x}_v. \end{cases} \quad (3.77)$$

Usando as definições dos coeficientes das duas formas fundamentais,

$$\begin{cases} -e = \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_u = \alpha_{11}E + \alpha_{12}F, \\ -f = \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_u = \alpha_{11}F + \alpha_{12}G, \\ -f = \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{N}_v = \alpha_{21}E + \alpha_{22}F, \\ -g = \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{N}_v = \alpha_{21}F + \alpha_{22}G. \end{cases} \quad (3.78)$$

Resolvendo o sistema de equações, obtemos:

$$\mathbf{N}_u = \frac{fF - eG}{EG - F^2}\mathbf{x}_u + \frac{eF - fE}{EG - F^2}\mathbf{x}_v \quad \text{e} \quad \mathbf{N}_v = \frac{gF - fG}{EG - F^2}\mathbf{x}_u + \frac{fF - gE}{EG - F^2}\mathbf{x}_v, \quad (3.79)$$

denominadas de **equações de Weingarten**, onde, pela associação com as equações de Gauss, são referidas ainda como **equações de Gauss-Weingarten** [39].

Por motivos que se mostrarão mais claros posteriormente, seremos motivados a aplicar as equações de Gauss visando obter uma forma alternativa para a curvatura gaussiana, isto é, em função apenas de E , F , G , u e v . Primeiramente, de (3.40), nota-se que

$$K = \frac{eg - f^2}{EG - F^2} = \frac{(\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v)(\mathbf{x}_{vv} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v) - (\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v)}{(EG - F^2)^2}. \quad (3.80)$$

Lançando do mão da conhecida propriedade entre determinantes $\det(AB) = \det(A)\det(B)$,

$$K = \frac{1}{(EG - F^2)^2} \left\{ \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_{vv} & \mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_v \\ \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{vv} & \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_v \\ \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{vv} & \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_{uv} & \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_v \\ \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{uv} & \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_v \\ \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{uv} & \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_u & \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v \end{vmatrix} \right\}. \quad (3.81)$$

Por simplicidade, impomos $F = x_u \cdot x_v = 0$. Assim,

$$\begin{aligned} K = \frac{1}{(EG)^2} \{ & (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_{vv})(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) - (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_v)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{vv}) \\ & - (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{vv})(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) - (\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_{uv})(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) \\ & + (\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_v)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{uv}) + (\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{uv})(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_v) \}. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Identificando os coeficientes E e G na equação anterior,

$$K = \frac{1}{(EG)^2} \{ (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_{vv} - \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_{uv}) EG - [(\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_v)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{uv}) - (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_v)(\mathbf{x}_v \cdot \mathbf{x}_{vv})] E \\ + [(\mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{uv}) - (\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_u)(\mathbf{x}_u \cdot \mathbf{x}_{vv})] G \}. \quad (3.83)$$

Utilizando os resultados (3.73) e reconhecendo que

$$\mathbf{x}_{uu} \cdot \mathbf{x}_{vv} - \mathbf{x}_{uv} \cdot \mathbf{x}_{uv} = -\frac{E_{vv}}{2} + F_{uv} - \frac{G_{uu}}{2} = -\frac{1}{2} (E_{vv} + G_{uu}), \quad (3.84)$$

obtemos:

$$K = \frac{1}{4\sqrt{EG}} \left[\frac{E_v E_v}{E} - \frac{E_v G_v}{G} - 2(E_{vv} + G_{uu}) \right], \quad (3.85)$$

de onde, pode-se verificar finalmente que

$$K = -\frac{1}{\sqrt{EG}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{\sqrt{E}} \frac{\partial \sqrt{G}}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial \sqrt{E}}{\partial v} \right) \right] \quad (3.86)$$

ou, de forma alternativa,

$$K = -\frac{1}{2\sqrt{EG}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{G_u}{\sqrt{EG}} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{E_v}{\sqrt{EG}} \right) \right] \quad (3.87)$$

3.7 Curvatura Geodésica (Tangencial)

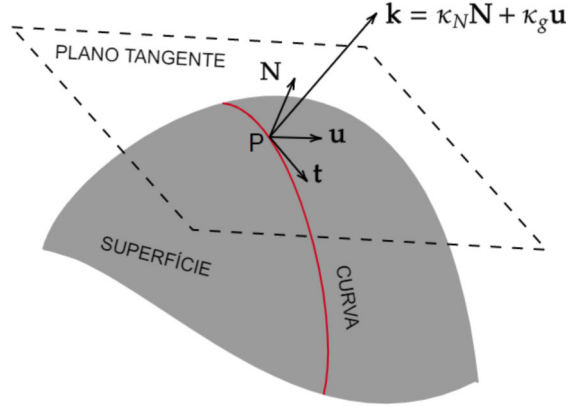
Na seção 3.3, vimos que o vetor de curvatura total em determinado ponto de uma superfície equivale à soma vetorial das contribuições da curvatura normal — paralela ao vetor normal unitário e ortogonal ao plano tangente — e da **curvatura geodésica**[†] ou **tangencial**.

Como o próprio nome sugere, o vetor de curvatura geodésica $\mathbf{k}_g$ está situado no plano tangente à superfície em um dado ponto P , porém ortogonal tanto à $\mathbf{N}$ quanto ao vetor tangente unitário $\mathbf{t}$ da curva (Figura 3.3). Para estabelecermos a sua direção, define-se um vetor unitário $\mathbf{u}$ sobre o plano tangente, ortogonal à $\mathbf{t}$ no sentido anti-horário de tal forma que $\mathbf{N} = \mathbf{t} \times \mathbf{u}$. Assim,

$$\mathbf{k}_g = \kappa_g \mathbf{u} \quad (3.88)$$

[†]A presença do termo *geodésica* pode vir a fazer o leitor indagar se existe alguma ligação entre a curvatura geodésica e a curva que representa a menor distância entre dois pontos, comumente chamadas na literatura de ‘geodésicas’. De fato, curvas que detêm tal característica especial apresentam curvatura geodésica nula. Para mais detalhes, consulte a referência [39].

Figura 3.3 – Representação do Vetor de Curvatura Total



Fonte: Próprio autor.

Logo, de (3.31) e (3.32),

$$\kappa_g = \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{t}}{ds} = (\mathbf{N} \times \mathbf{t}) \cdot \mathbf{t}'. \quad (3.89)$$

Da equação (3.15), pode-se aferir que o vetor $\mathbf{t}$ satisfaz

$$\mathbf{t} = \mathbf{x}_u \left(\frac{du}{ds} \right) + \mathbf{x}_v \left(\frac{dv}{ds} \right) = \mathbf{x}_u u' + \mathbf{x}_v v' \quad (3.90)$$

e, portanto,

$$\mathbf{t}' = \mathbf{x}_{uu}(u')^2 + \mathbf{x}_u u'' + 2\mathbf{x}_{uv}u'v' + \mathbf{x}_v v'' + \mathbf{x}_{vv}(v')^2. \quad (3.91)$$

Recorrendo à propriedade do produto triplo $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{B}$,

$$\begin{aligned} \kappa_g &= [(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uu}) \cdot (u')^3 + (2\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uv} + \mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{uu})(u')^2 v'] \cdot \mathbf{N} \\ &\quad + [(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{vv} + 2\mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{uv})u'(v')^2 + (\mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{vv})(v')^3 + (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v)(u'v'' - u''v')] \cdot \mathbf{N}. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Visando desenvolver a última equação, lembremos que $\mathbf{N} = (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v)/\sqrt{EF - G^2}$ e façamos uso da identidade vetorial $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{B} \times \mathbf{C})(\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})$. Obtêm-se:

$$(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uu}) \cdot \mathbf{N} = \frac{(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uu}) \cdot (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_v)}{\sqrt{EF - G^2}} = \frac{2EE_u - EE_v - FE_u}{\sqrt{EF - G^2}}. \quad (3.93)$$

A partir dos símbolos de Christoffel do segundo tipo definidos em (3.75),

$$(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uu}) \cdot \mathbf{N} = \Gamma_{11}^2 \sqrt{EF - G^2}. \quad (3.94)$$

Analogamente,

$$\begin{aligned}
(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uv}) \cdot \mathbf{N} &= \Gamma_{12}^2 \sqrt{EF - G^2}, & (\mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{uv}) \cdot \mathbf{N} &= -\Gamma_{11}^1 \sqrt{EF - G^2}, \\
(\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{vv}) \cdot \mathbf{N} &= \Gamma_{22}^2 \sqrt{EF - G^2}, & (\mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{vv}) \cdot \mathbf{N} &= -\Gamma_{12}^1 \sqrt{EF - G^2}, \\
(\mathbf{x}_v \times \mathbf{x}_{uv}) \cdot \mathbf{N} &= \Gamma_{22}^1 \sqrt{EF - G^2} \quad \text{e} \quad (\mathbf{x}_u \times \mathbf{x}_{uv}) \cdot \mathbf{N} = \sqrt{EF - G^2}.
\end{aligned} \tag{3.95}$$

Finalmente, substituindo tais resultados em (3.92),

$$\begin{aligned}
\kappa_g &= [\Gamma_{11}^2 (u')^3 + (2\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^1) (u')^2 v'] \sqrt{EF - G^2} \\
&+ [(\Gamma_{22}^2 - 2\Gamma_{12}^1) u' (v')^2 - \Gamma_{22}^1 (v')^3 + u' v'' - u'' v'] \sqrt{EF - G^2}.
\end{aligned} \tag{3.96}$$

A expressão anterior mostra explicitamente que a curvatura geodésica depende apenas de E , F , G , suas respectivas derivadas e de u' , v' , u'' e v'' . Quando dada superfície sofre uma deformação de tal forma que suas curvas coordenadas mantenham sua posição relativa à superfície, fazendo com que a distância entre dois pontos ou com que o ângulo entre duas curvas se mantenha inalterado[‡], os coeficientes da primeira forma fundamental E , F , G e o elemento de distância ds também não irão se alterar bem como u' , v' , u'' e v'' . Por conseguinte, podemos afirmar que uma quantidade satisfazendo tais condições será uma **invariante de curvatura**, como é o caso da curvatura geodésica. Tal resultado é conhecido formalmente como **teorema de Gauss** [39].

Como discutido na última seção do Capítulo 2, o objeto final de estudo deste trabalho consistirá de uma amostra cônica que, por sua vez, apresenta curvas coordenadas **ortogonais**. Desse modo, calculando κ_g para as curvas coordenadas, temos:

$$\begin{aligned}
\kappa_{g1}(v=\text{constante}) &= \Gamma_{11}^2 (u')^3 = \Gamma_{11}^2 \frac{\sqrt{EG - F^2}}{E\sqrt{E}}, \\
\kappa_{g2}(u=\text{constante}) &= \Gamma_{22}^1 (v')^3 = \Gamma_{22}^1 \frac{\sqrt{EG - F^2}}{G\sqrt{G}};
\end{aligned} \tag{3.97}$$

onde usamos que, de acordo com primeira forma fundamental, $u' = 1/\sqrt{E}$ e $v' = 1/\sqrt{G}$. No caso em que as direções são ortogonais ($F = 0$),

$$\kappa_{g1} = -\frac{E_v}{2E\sqrt{G}} \quad \text{e} \quad \kappa_{g2} = \frac{G_u}{2G\sqrt{E}}. \tag{3.98}$$

Além disso, vamos definir dois vetores unitários $\mathbf{i}_1$ e $\mathbf{i}_2$ tangentes às curvas coordenadas $v = \text{constante}$ e $u = \text{constante}$, respectivamente. Assim, as curvaturas geodésicas em tais

[‡]Podemos visualizar isso desenhando duas linhas retas que se cruzam em uma folha de papel retangular e, em seguida, curvando-a até formar uma superfície cilíndrica [39].

direções são descritas, em acordo com (3.89), como

$$\kappa_{g1} = \mathbf{i}_1 \cdot \frac{d\mathbf{i}_2}{ds_1} \quad \text{e} \quad \kappa_{g2} = \mathbf{i}_2 \cdot \frac{d\mathbf{i}_1}{ds_2}, \quad (3.99)$$

onde s_1 e s_2 correspondem aos comprimentos de arco das respectivas curvas, tal que $ds_1 = \sqrt{E}du$ e $ds_2 = \sqrt{G}dv$ (primeira forma fundamental). Se a curva $v = \text{constante}$ faz um ângulo θ com uma dada curva $\mathbf{x}(s)$ num ponto P , segue que

$$\mathbf{t} = \mathbf{i}_1 \cos \theta + \mathbf{i}_2 \sin \theta. \quad (3.100)$$

Diferenciando $\mathbf{t}$ ao longo de $\mathbf{x}(s)$,

$$\frac{d\mathbf{t}}{ds} = \frac{d\mathbf{i}_1}{ds} \cos \theta + \frac{d\mathbf{i}_2}{ds} \sin \theta + \mathbf{u} \frac{d\theta}{ds}, \quad (3.101)$$

onde usamos que $\mathbf{u} = -\sin \theta \mathbf{i}_1 + \cos \theta \mathbf{i}_2$. Ademais, uma vez que $ds^2 = ds_1^2 + ds_2^2$, conseguimos determinar que

$$\frac{d\mathbf{i}_\alpha}{ds} = \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial u} \frac{du}{ds} + \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial v} \frac{dv}{ds} = \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial s_1} \frac{\partial s_1}{\partial s} + \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial s_2} \frac{\partial s_2}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial s_1} \cos \theta + \frac{\partial \mathbf{i}_\alpha}{\partial s_2} \sin \theta, \quad (3.102)$$

onde $\alpha = \{1, 2\}$. Usando a definição de κ_g dada em (3.89) e substituindo o último resultado em (3.101), resta que

$$\begin{aligned} \kappa_g &= \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{t}}{ds} = \frac{d\theta}{ds} + \kappa_{g1}(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \cos \theta + \kappa_{g2}(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \sin \theta, \\ \kappa_g &= \frac{d\theta}{ds} + \kappa_{g1} \cos \theta + \kappa_{g2} \sin \theta; \end{aligned} \quad (3.103)$$

conhecida na literatura como a **fórmula de Liouville** para a curvatura geodésica [39].

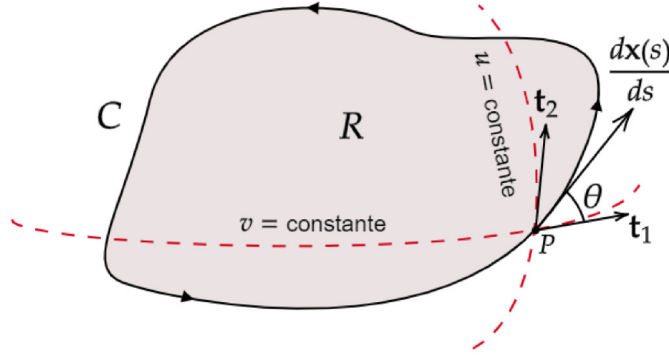
A fórmula de Liouville será extremamente necessária na próxima e última seção deste capítulo, onde trataremos sobre um importante resultado publicado por Bonnet, mas já conhecido também por Gauss na mesma época, cuja questão abordada se refere ao cálculo da **integral de curvatura** gaussiana ou total K sobre uma dada superfície fechada.

3.8 Teorema de Gauss-Bonnet

Considere uma região R delimitada por uma curva C suave[§] orientada positivamente como mostra a figura abaixo:

[§]Classificar uma curva como ‘suave’ significa constatar que a sua derivada é contínua em todo o percurso ou, em outras palavras, que não possui ‘cantos’.

Figura 3.4 – Região R Delimitada por uma Curva Suave C



Fonte: Próprio autor.

A curva C faz um ângulo θ com a curva coordenada $v = \text{constante}$ (ortogonal a $u = \text{constante}$) no ponto P indicado. Desse modo, pela fórmula de Liouville,

$$\kappa_g ds = d\theta + \kappa_{g1} \cos \theta ds + \kappa_{g2} \sin \theta ds. \quad (3.104)$$

De acordo primeira forma fundamental, $ds^2 = Edu^2 + Gdv^2$ e, associando-a com a Figura 3.4, conclui-se que

$$\cos \theta ds = \sqrt{E} du \quad \text{e} \quad \sin \theta ds = \sqrt{G} dv. \quad (3.105)$$

Substituindo em (3.104), segue que

$$\kappa_g ds = d\theta + \kappa_{g1} \sqrt{E} du + \kappa_{g2} \sqrt{G} dv. \quad (3.106)$$

Sendo a região R fechada e sendo tanto E quanto G funções contínuas de u e v com derivadas parciais também contínuas, podemos invocar o **teorema de Green** na equação anterior de forma que tenhamos

$$\oint_C (\kappa_{g1} \sqrt{E}) du + (\kappa_{g2} \sqrt{G}) dv = \iint_R \left[\frac{\partial}{\partial u} (\kappa_{g2} \sqrt{G}) + \frac{\partial}{\partial v} (\kappa_{g1} \sqrt{E}) \right] dudv. \quad (3.107)$$

Agora, se dA é o elemento de área da região R , obtemos

$$\oint_C \kappa_g ds = \oint_C d\theta + \frac{1}{\sqrt{EG}} \iint_R \left[\frac{\partial}{\partial u} (\kappa_{g2} \sqrt{G}) + \frac{\partial}{\partial v} (\kappa_{g1} \sqrt{E}) \right] dA. \quad (3.108)$$

Reconhecemos, através de (3.87) que

$$\frac{1}{\sqrt{EG}} \left[\frac{\partial}{\partial u} (\kappa_{g2} \sqrt{G}) + \frac{\partial}{\partial v} (\kappa_{g1} \sqrt{E}) \right] = \frac{1}{2\sqrt{EG}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{G_u}{\sqrt{EG}} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{E_v}{\sqrt{EG}} \right) \right] = -K, \quad (3.109)$$

onde K é a curvatura gaussiana ou total introduzida anteriormente. A integral $\oint_C d\theta$ computa a variação total do ângulo θ ao longo do percurso em C . Uma vez que a região R é simplesmente conexa[¶], pode-se reduzir C continuamente tendendo a um ponto. Assim, concluímos que

$$\oint_C d\theta = 2\pi. \quad (3.110)$$

Com o último resultado, obtemos finalmente o **teorema de Gauss-Bonnet** [39, 40]:

$$\iint_R K dA + \oint_C \kappa_g ds = 2\pi, \quad (3.111)$$

válido para uma região delimitada por uma curva fechada suave. Entretanto, mesmo se a curva delimitante não for suave, é possível adaptar o teorema de Gauss-Bonnet para uma forma mais geral, onde decompos a curva C em N curvas suaves $C_1, \dots, C_N$ que se encontram nos ‘pontos de canto’ formando vértices (o triângulo é um exemplo). Porém, neste caso, a quantidade $\oint_C d\theta$ não será mais equivalente a 2π , uma vez que parte das variação angular ao longo do percurso será devido às mudanças bruscas de direção nos vértices, enquanto que $\oint_C d\theta$ compreende somente a variação angular nas curvas suaves $C_1, \dots, C_N$.

Se $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_i, \dots, \theta_N$ corresponderem aos **ângulos externos** nos vértices da região, então a parcela correspondente à $\oint_C d\theta$ será

$$\oint_C d\theta = 2\pi - \sum_{i=1}^N \theta_i. \quad (3.112)$$

Portanto,

$$\iint_R K dA + \oint_C \kappa_g ds = 2\pi - \sum_{i=1}^N \theta_i \quad (3.113)$$

é a forma geral do teorema de Gauss-Bonnet.

[¶]Define-se uma região simplesmente conexa como aquela na qual sempre é possível traçar uma curva contendo somente pontos pertencentes à própria região de tal forma que não contenha pontos não pertencentes em seu interior. Regiões com buracos não são simplesmente conexas, por exemplo.

Capítulo 4

Mecânica Quântica de uma Partícula Confinada a uma Superfície

Neste capítulo, pelo fato de estarmos interessados no problema de elétrons confinados em um anel quântico bidimensional com curvatura cônica, abordaremos de forma geral a mecânica quântica de uma partícula em dada superfície tridimensional com curvatura [16]. Posteriormente, particularizaremos os resultados para o contexto alvo e buscaremos incluir campos eletromagnéticos no sistema [17].

4.1 Equação de Schrödinger para uma Partícula Confinada a uma Superfície

Considere uma superfície $\mathcal{S}$ descrita pela equação paramétrica $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2)$ de parâmetros independentes q_1 e q_2 e seja $\mathbf{N} = \mathbf{N}(q_1, q_2)$ o vetor normal unitário desta superfície tal como definido no Capítulo 2.

A superfície $\mathcal{S}$ está inserida em um subespaço $\mathcal{V}$ do $\mathbb{R}^3$ (Figura 4.1a) que, por sua vez, pode ser parametrizado por

$$\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \mathbf{N}(q_1, q_2), \quad (4.1)$$

onde o valor absoluto de q_3 * fornece, para pontos onde $\mathcal{S}$ é não-singular, a distância entre

*É possível que o subíndice inferior para designar uma coordenada possa parecer estranho aqui. Para evitar um carregamento excessivo de notação, apenas quando os elementos de q^i forem expressos explicitamente, tal como q_1 e q_3 , utilizaremos o índice na posição inferior.

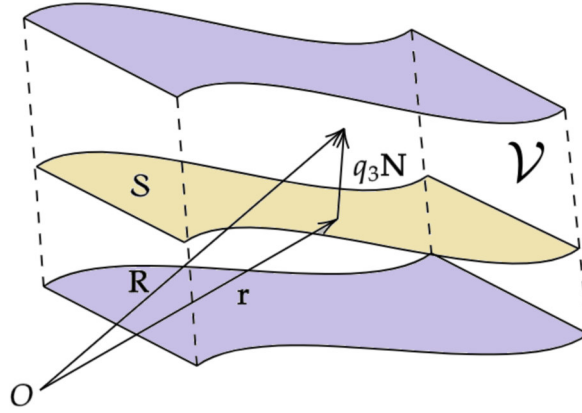
um ponto arbitrário de $\mathcal{V}$ e a superfície.

Uma partícula de massa m está confinada à superfície por um potencial externo $V_\lambda(q_3)$ que, para valores do **parâmetro de confinamento** $\lambda \rightarrow \infty$, aumenta abruptamente para pequenos deslocamentos infinitesimais de q_3 . Ou seja,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3) = \begin{cases} 0, & q_3 = 0; \\ \infty, & q_3 \neq 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Assim, o fator λ determina a intensidade do confinamento.

Figura 4.1 – Subespaço $\mathcal{V} \in \mathbb{R}^3$



(a) a superfície $\mathcal{S}$ está incluída e q_3 representa o módulo da distância normal à superfície. Fonte: Próprio autor.

O próximo passo é obtermos a equação de Schrödinger para o sistema, isto é, para o subespaço $\mathcal{V}$ (que inclui $\mathcal{S}$). Em coordenadas curvilíneas gerais, tal equação é expressa como, segundo o resultado do APÊNDICE B,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \Psi}{\partial q^j} \right) + V_\lambda(q_3) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (4.3)$$

onde G_{ij} é o tensor métrico do subespaço $\mathcal{V}$ dado por

$$G_{ij} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^j} \quad (4.4)$$

e $G = \det G_{ij}$.

Estamos interessados em uma nova função de onda $\chi(q_1, q_2, q_3, t)$ capaz de ser separável em uma parte tangencial $\chi_t(q_1, q_2, t)$, que depende apenas dos parâmetros da superfície q_1 e q_2 , e em uma parte normal $\chi_n(q_3, t)$ na forma

$$\chi(q_1, q_2, q_3, t) = \chi_t(q_1, q_2, t) \chi_n(q_3, t), \quad (4.5)$$

de modo que ainda seja possível definir uma densidade de probabilidade $|\chi(q_1, q_2, q_3, t)|^2$ que leve à mesma probabilidade total tal qual $|\Psi(q_1, q_2, q_3, t)|^2$. A correspondente transformação $\Psi \rightarrow \chi$ pode ser determinada através do elemento infinitesimal de volume dV do subespaço $\mathcal{V}$, pois, de (3.22),

$$dV = dS dq_3 = \sqrt{G} dq_1 dq_2 dq_3 = f(q_1, q_2, q_3) \sqrt{g} dq_1 dq_2 dq_3, \quad (4.6)$$

onde g_{ij} é o tensor métrico da superfície $\mathcal{S}$ como definido em (3.62), $g = \det g_{ij}$ e $f = f(q_1, q_2, q_3)$ é uma função desconhecida que relaciona G e g da forma

$$G = f^2 g. \quad (4.7)$$

Portanto, para que a probabilidade total não seja afetada,

$$\chi(q_1, q_2, q_3, t) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \Psi(q_1, q_2, q_3, t). \quad (4.8)$$

Então, temos apenas que determinar $f(q_1, q_2, q_3)$. Uma vez que a derivada de um vetor normal a uma superfície se situa no plano tangente em determinado ponto, faz sentido expressarmos tais derivadas como uma combinação linear das derivadas na superfície

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q^i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j}, \quad (4.9)$$

onde α_{ij} são dados pelas **equações de Weingarten** obtidas em (3.79) :

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= \frac{1}{g} (g_{12} h_{21} - g_{22} h_{11}), & \alpha_{12} &= \frac{1}{g} (h_{11} g_{21} - h_{21} g_{11}), \\ \alpha_{21} &= \frac{1}{g} (h_{22} g_{12} - h_{12} g_{21}), & \alpha_{22} &= \frac{1}{g} (h_{21} g_{12} - h_{22} g_{11}). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Deste último resultado, juntamente com (3.49) e (3.50), reescrevemos

$$M = -\frac{\text{Tr}(\alpha_{ij})}{2} \quad \text{e} \quad K = \det \alpha_{ij}. \quad (4.11)$$

Então, substituindo (4.9) em (4.1),

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + \alpha_{ij} q_3) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j}, & i, j = \{1, 2\}; \\ \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_3} = \mathbf{N}(q_1, q_2). \end{cases} \quad (4.12)$$

Portanto, para $i, j = \{1, 2\}$

$$G_{ij} = \left[\sum_{k=1}^2 (\delta_{ik} + \alpha_{ik} q_3) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_k} \right] \cdot \left[\sum_{l=1}^2 (\delta_{jl} + \alpha_{jl} q_3) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_l} \right] \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^2 [\delta_{ik} \delta_{jl} + (\alpha_{ik} \delta_{jl} + \alpha_{jl} \delta_{ik}) q_3 + \alpha_{ik} \alpha_{jl} q_3^2] g_{kl}, \\
&= g_{ij} + \left[\left(\sum_{k=1}^2 \alpha_{ik} g_{kj} \right) + \left(\sum_{l=1}^2 \alpha_{jl} g_{li} \right) \right] q_3 + \left(\sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^2 \alpha_{ik} g_{kl} \alpha_{jl} \right) q_3^2, \\
G_{ij} &= g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T] q_3 + (\alpha g \alpha^T) q_3^2.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Enquanto que

$$G_{i3} = G_{3i} = 0, \quad i = \{1, 2\} \quad \text{e} \quad G_{33} = 1. \tag{4.15}$$

Logo,

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ G_{21} & G_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{4.16}$$

de modo que, no limite $q_3 \rightarrow 0$,

$$\lim_{q_3 \rightarrow 0} G_{ij} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4.17}$$

Comparando as duas últimas expressões, podemos esperar que, no regime em que a partícula está completamente presa à superfície, $f \rightarrow 1$ e, então G se reduz à g .

Então, uma vez que os $G_{i3} = 0$, a equação de Schrödinger (4.3) pode ser decomposta em duas partes: uma parte superficial onde $i = \{1, 2\}$ e uma parte normal onde $i = 3$.

Assim,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{D}(q_1, q_2, q_3) \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \ln \sqrt{G}}{\partial q_3} \frac{\partial \Psi}{\partial q_3} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q_3^2} \right] + V_\lambda(q_3) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \tag{4.18}$$

com

$$\mathcal{D}(q_1, q_2, q_3) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} \right) \tag{4.19}$$

sendo um operador que representa a parte superficial.

De (4.16),

$$G = \det G_{ij} = G_{11} G_{22} - G_{12} G_{21}. \tag{4.20}$$

Mas, ainda precisamos determinar os elementos G_{ij} explicitamente a partir de (4.14). Com o auxílio das equações de Weingarten,

$$\alpha g = \frac{1}{g} \begin{pmatrix} g_{12}h_{21} - g_{22}h_{11} & h_{11}g_{21} - h_{21}g_{11} \\ h_{22}g_{12} - h_{12}g_{21} & h_{21}g_{12} - h_{22}g_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

$$\alpha g = - \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} = (\alpha g)^T, \quad (4.22)$$

devido a simetria do tensor h_{ij} . Então,

$$\alpha g + (\alpha g)^T = -2 \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

e, com a ajuda de (4.22),

$$\alpha g \alpha^T = - \begin{pmatrix} h_{11}\alpha_{11} + h_{12}\alpha_{12} & h_{11}\alpha_{21} + h_{12}\alpha_{22} \\ h_{21}\alpha_{11} + h_{22}\alpha_{12} & h_{21}\alpha_{21} + h_{22}\alpha_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Dessa forma,

$$\begin{cases} G_{11} = g_{11} - 2h_{11}q_3 - h_{11}\alpha_{11}q_3^2 - h_{12}\alpha_{12}q_3^2, \\ G_{12} = g_{12} - 2h_{12}q_3 - h_{11}\alpha_{21}q_3^2 - h_{12}\alpha_{22}q_3^2, \\ G_{21} = g_{21} - 2h_{21}q_3 - h_{21}\alpha_{11}q_3^2 - h_{22}\alpha_{12}q_3^2, \\ G_{22} = g_{22} - 2h_{22}q_3 - h_{21}\alpha_{21}q_3^2 - h_{22}\alpha_{22}q_3^2. \end{cases} \quad (4.25)$$

Usando tais resultados em (4.20), obtemos uma enorme expressão

$$\begin{aligned} G = & g_{11}g_{22} - 2h_{22}g_{11}q_3 - h_{21}g_{11}\alpha_{21}q_3^2 - g_{11}h_{22}\alpha_{22}q_3^2 - 2g_{22}h_{11}q_3 + 4h_{11}h_{22}q_3^2 \\ & + 2h_{11}h_{12}\alpha_{12}q_3^3 + 2h_{11}h_{22}\alpha_{22}q_3^3 - g_{22}h_{11}\alpha_{11}q_3^2 + 2h_{11}h_{22}\alpha_{11}q_3^3 + h_{11}h_{21}\alpha_{11}\alpha_{21}q_3^4 \\ & + h_{11}h_{22}\alpha_{11}\alpha_{22}q_3^4 - g_{22}h_{12}\alpha_{12}q_3^2 + 2h_{12}h_{22}\alpha_{12}q_3^3 + h_{12}h_{21}\alpha_{12}\alpha_{21}q_3^4 + h_{12}h_{22}\alpha_{12}\alpha_{22}q_3^4 \\ & - (g_{12}g_{21} - 2g_{12}h_{21}q_3 - g_{12}h_{21}\alpha_{11}q_3^2 - g_{12}h_{22}\alpha_{12}q_3^2 - 2g_{21}h_{12}q_3 + 4h_{21}h_{12}q_3^2 + 2h_{12}h_{21}\alpha_{11}q_3^3 \\ & + 2h_{12}h_{22}\alpha_{12}q_3^3 - g_{21}h_{11}\alpha_{21}q_3^2 + 2h_{11}h_{21}\alpha_{21}q_3^3 + h_{11}h_{21}\alpha_{21}\alpha_{11}q_3^4 + h_{11}h_{22}\alpha_{21}\alpha_{12}q_3^4 \\ & - g_{21}h_{12}\alpha_{22}q_3^2 + 2h_{12}h_{21}\alpha_{22}q_3^3 + h_{12}h_{21}\alpha_{11}\alpha_{22}q_3^4 + h_{12}h_{22}\alpha_{22}\alpha_{12}q_3^4). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Entretanto, se lançarmos mão da simetria dos tensores g_{ij} e h_{ij} e se somarmos e subtrairmos os termos

$$\frac{2g_{11}g_{22}h_{11}h_{22}}{g} \quad \text{e} \quad 2g_{12}g_{12}h_{12}h_{12} \quad (4.27)$$

em tal expressão, conseguiremos agrupar todos os termos na forma

$$\begin{aligned}
G &= (g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}) - 2(g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12})q_3^2 \\
&\quad + [2(h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}) + (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12})^2]q_3^2 \\
&\quad + 2(\alpha_{11} + \alpha_{22})(h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21})q_3^3 + (h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21})(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})q_3^4. \quad (4.28)
\end{aligned}$$

Portanto, reconhecendo de (3.69), (3.70) e (4.11),

$$G = [1 - 2Mq_3 + Kq_3^2]^2 g \equiv [1 + \text{Tr}(\alpha_{ij})q_3 + \det(\alpha_{ij})q_3^2]^2 g \quad (4.29)$$

e, consequentemente,

$$f = f(q_1, q_2, q_3) = 1 - 2Mq_3 + Kq_3^2 \equiv 1 + \text{Tr}(\alpha_{ij})q_3 + \det(\alpha_{ij})q_3^2. \quad (4.30)$$

Note que, como esperado, $f \rightarrow 1$ no limite $q_3 \rightarrow 0$ e $G \rightarrow g$.

Finalmente, substituindo a transformação (4.8) na equação de Schrödinger (4.18),

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{D}(q_1, q_2, q_3)\chi - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial q_3^2} \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \frac{\partial \ln(f\sqrt{g})}{\partial q_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \right] \\
& + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (4.31)
\end{aligned}$$

Uma vez que $V_\lambda(q_3)$ aumenta abruptamente para pequenas variações de q_3 em torno que $q_3 = 0$, a função de onda χ será diferente de zero apenas para valores onde $q_3 \approx 0$. Dessa forma, podemos tomar o limite de $q_3 \rightarrow 0$ em todos os termos da equação anterior, exceto nas derivadas e, é claro, em $V_\lambda(q_3)$. Notando ainda que

$$\frac{\partial}{\partial q_3}(f^{-1/2}\chi) = -\frac{1}{2}f^{-3/2}\frac{\partial f}{\partial q_3}\chi + f^{-1/2}\frac{\partial \chi}{\partial q_3}, \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial q_3^2}(f^{-1/2}\chi) = \frac{1}{2} \left[\frac{3}{2}f^{-5/2} \left(\frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - f^{-3/2} \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \chi - \frac{1}{2}f^{-3/2} \frac{\partial f}{\partial q_3} \frac{\partial \chi}{\partial q_3} + f^{-1/2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} \quad (4.33)$$

e

$$\frac{\partial \ln(f\sqrt{g})}{\partial q_3} = \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial q_3}; \quad (4.34)$$

obtemos, lembrando de (4.17),

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}\mathcal{D}(q_1, q_2, q_3)\chi - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \chi \right\} \\
& + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad (4.35)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q^j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr } \alpha_{ij} \right)^2 - \det \alpha_{ij} \right] \chi \\
& - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Aplicando, agora, a forma separável (4.5),

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2 \chi_n}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) - \frac{\hbar^2 \chi_n}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr } \alpha_{ij} \right)^2 - \det \alpha_{ij} \right] \chi_t \\
& - \frac{\hbar^2 \chi_t}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + \chi_t V_\lambda(q_3) \chi_n = i\hbar \chi_n \frac{\partial \chi_t}{\partial t} + i\hbar \chi_t \frac{\partial \chi_n}{\partial t}.
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Dividindo por $\chi_n \chi_t$,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m \chi_t} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr } \alpha_{ij} \right)^2 - \det \alpha_{ij} \right] - \frac{i\hbar}{\chi_t} \frac{\partial \chi_t}{\partial t} \\
& - \frac{\hbar^2}{2m \chi_n} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) - \frac{i\hbar}{\chi_n} \frac{\partial \chi_n}{\partial t} = 0.
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Portanto, identificamos duas equações independentes:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi_n = i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t} \tag{4.39}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr } \alpha_{ij} \right)^2 - \det \alpha_{ij} \right] \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t}. \tag{4.40}$$

A primeira delas nada mais é do que a equação de Schrödinger unidimensional sob um potencial externo $V_\lambda(q_3)$ para a coordenada normal q_3 e, dessa forma, não iremos nos preocupar com ela posteriormente. Por outro lado, a segunda é uma equação de Schrödinger para a superfície com curvatura, onde se nota a presença de um termo novo análogo a um potencial que depende apenas das propriedades geométricas da superfície M e K :

$$V_S = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr } \alpha_{ij} \right)^2 - \det \alpha_{ij} \right] \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K). \tag{4.41}$$

Observamos que, pelo fato de não haver outras fontes de campo externo, este potencial tem sua origem puramente relacionada a geometria da superfície, ou seja, às suas curvaturas média e gaussiana, sendo, por isso, denominado de **Potencial Geométrico**. Assim, para uma superfície completamente plana, $V_S = 0$ e retornamos à equação de Schrödinger bidimensional usual.

4.2 Potencial Geométrico para o Defeito Cônico

Como aplicação direta ao objeto de estudo deste trabalho, vamos buscar determinar o potencial geométrico de uma superfície curva com defeito cônico definido pela equação paramétrica (2.94). Derivando tal relação com respeito aos parâmetros, obtemos

$$\mathbf{x}_r = (\alpha \cos \varphi, \alpha \sin \varphi, \sqrt{1 - \alpha^2}) \quad \text{e} \quad \mathbf{x}_\varphi = (-\alpha r \sin \varphi, \alpha r \cos \varphi, 0). \quad (4.42)$$

Então, os coeficientes da primeira forma fundamental serão dados por

$$E = \mathbf{x}_r \cdot \mathbf{x}_r = 1, \quad F = \mathbf{x}_r \cdot \mathbf{x}_\varphi = 0 \quad \text{e} \quad G = \mathbf{x}_\varphi \cdot \mathbf{x}_\varphi = \alpha^2 r^2, \quad (4.43)$$

o que leva ao elemento de distância

$$ds^2 = dr^2 + \alpha^2 r^2 d\varphi^2 \quad (4.44)$$

e ao tensor métrico

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha^2 r^2 \end{pmatrix}. \quad (4.45)$$

Resta-nos agora determinar os coeficientes da segunda forma fundamental. Para isso, calculamos que

$$\mathbf{x}_{rr} = (0, 0, 0), \quad \mathbf{x}_{r\varphi} = (-\alpha \sin \varphi, \alpha \cos \varphi, 0) \quad \text{e} \quad \mathbf{x}_{\varphi\varphi} = -(\alpha r \cos \varphi, \alpha r \sin \varphi, 0) \quad (4.46)$$

e

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{x}_r \times \mathbf{x}_\varphi}{\|\mathbf{x}_r \times \mathbf{x}_\varphi\|} = (-\sqrt{1 - \alpha^2} \cos \varphi, -\sqrt{1 - \alpha^2} \sin \varphi, \alpha). \quad (4.47)$$

Desse modo, concluímos que os coeficientes da segunda forma fundamental serão

$$e = \mathbf{x}_{rr} \cdot \mathbf{N} = 0, \quad f = \mathbf{x}_{r\varphi} \cdot \mathbf{N} = 0 \quad \text{e} \quad g = \mathbf{x}_{\varphi\varphi} \cdot \mathbf{N} = \alpha r \sqrt{1 - \alpha^2}, \quad (4.48)$$

o que leva a matriz de coeficientes

$$h_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \alpha r \sqrt{1 - \alpha^2} \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Portanto, através da expressão (3.70), a curvatura média M será dada por

$$M = \frac{\sqrt{1 - \alpha^2}}{2\alpha r}. \quad (4.50)$$

Entretanto, a curvatura gaussiana K fornecida pela expressão (3.70) será aparentemente nula em toda a superfície, pois $\det h_{ij} = 0$. Porém, a partir dos resultados (3.98) e da

fórmula de Liouville (3.103), obtemos que a curvatura geodésica k_g para a superfície do cone é dada por $k_g = 1/r$. Logo,

$$\int_{\mathcal{C}} k_g ds = \alpha \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi\alpha \quad (4.51)$$

e, assim, pelo Teorema de Gauss-Bonnet,

$$\iint_A K dA = 2\pi - \int_{\mathcal{C}} k_g ds = 2\pi(1 - \alpha). \quad (4.52)$$

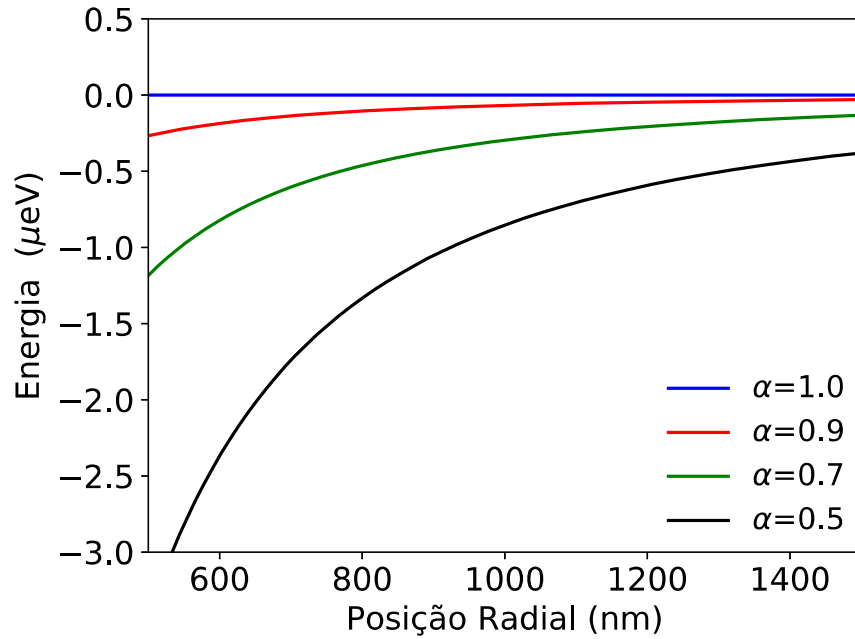
Tal resultado sugere que deve existir uma contribuição do tipo **delta de Dirac** na curvatura gaussiana da forma

$$K = \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r}. \quad (4.53)$$

Dessa forma, o potencial geométrico para uma superfície com defeito cônico será dada explicitamente por

$$V_S = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{(1 - \alpha^2)}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right]. \quad (4.54)$$

Figura 4.2 – Potencial Geométrico em Função da Posição Radial



Fonte: Próprio autor.

Como esperado, $V_s \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow 1$. Percebe-se ainda que na superfície (excluindo-se o vértice do cone) existe apenas um potencial atrativo em direção ao eixo central do anel $r = 0$, onde está presente um potencial repulsivo de curto alcance representado pela função delta de Dirac.

Na Figura 4.2, é mostrado o comportamento do potencial geométrico com a posição radial para diferentes valores de α . Constata-se, portanto, que sua influência se torna cada vez mais intensa à medida que α diminui, isto é, à medida que a curvatura no sistema aumenta. Para a faixa radial obtida no Capítulo 2 (1278 nm a 1427 nm), a interação atrativa produzida pelo potencial geométrico não ultrapassa $0,18 \mu\text{eV}$.

4.3 Aplicação de Campo Elétrico e Magnético na Superfície

Agora, buscaremos derivar, usando os resultados prévios obtidos na seção anterior pelo procedimento de da Costa [16], uma equação de Schrödinger que inclua os efeitos de campos elétricos e magnéticos para que, dessa forma, sejamos capazes de descrever adequadamente estruturas nanométricas bidimensionais curvas que estejam sob a ação de tais campos.

Partimos da equação de Schrödinger tridimensional para uma partícula livre de massa m e carga Q sob a ação de um campo elétrico $\mathbf{E} = -\nabla V$ escrita em um sistema de coordenadas curvilíneas gerais. Usando a notação covariante para as derivadas e a convenção de **soma de Einstein**, temos:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} G^{ij} D_i D_j \Psi(\mathbf{x}, t) + QV \Psi(\mathbf{x}, t), \quad (4.55)$$

onde $i, j = \{1, 2, 3\}$ e $D_j = \nabla_j - \frac{iQ}{\hbar} A_j$. Através do acoplamento mínimo $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - Q\mathbf{A}$, inserimos o potencial vetor do campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. A derivada covariante ∇_j é expressa por $\nabla_j v^i = \partial_j v^i + \Gamma_{jk}^i v^k$ com v^i sendo as componentes de um vetor tridimensional $\mathbf{v}$ e Γ_{jk}^i os **símbolos de Christoffel do segundo tipo** definidos como

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{im} (\partial_j g_{km} + \partial_k g_{mj} - \partial_m g_{jk}). \quad (4.56)$$

Dessa forma, rescrevemos (4.55) como:

$$i\hbar D_0 \Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} G^{ij} D_i D_j \Psi(\mathbf{x}, t), \quad (4.57)$$

com $A_0 = -V$ e, conseqüentemente, $D_0 = \partial_t - \frac{iQ}{\hbar}A_0$.

Uma vez que a equação de Schrödinger (4.57) compreende apenas os potenciais V e $\mathbf{A}$ em vez dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ diretamente, faz sentido nos perguntarmos, dado que não são definidos de forma unívoca, se tal equação preserva sua **invariância** perante **transformações de calibre** para os mesmos potenciais.

Aplicamos transformações de calibre da forma

$$V' \rightarrow V - \frac{\partial \zeta}{\partial t} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}' \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \zeta \quad (4.58)$$

na versão da equação (4.57) para Ψ' , V' e $\mathbf{A}'$, onde $\zeta = \zeta(\mathbf{r}, t)$ é a função de calibre. Além disso, como discutido em [41], os valores esperados do operador posição serão preservados, mediante as tranformações (4.58), desde que

$$\Psi' \rightarrow \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right)\Psi. \quad (4.59)$$

Sem perda de generalidade, iremos demonstrar tal propriedade apenas para o caso cartesiano, isto é, $G^{ij} = \mathbb{1}_3$ e $G = 1$. Então, explicitamente, a versão da equação (4.57) para Ψ' , V' e $\mathbf{A}'$ fica

$$\left[\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - Q\mathbf{A}') \cdot (-i\hbar\nabla - Q\mathbf{A}') \right] \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} - QV\Psi'. \quad (4.60)$$

Expandindo o termo entre colchetes,

$$\begin{aligned} (-i\hbar\nabla - Q\mathbf{A}') \cdot (-i\hbar\nabla - Q\mathbf{A}') &= -\hbar^2 \nabla^2 \Psi' \\ &\quad + i\hbar Q (2\mathbf{A}' \cdot \nabla \Psi' + \Psi' \nabla \cdot \mathbf{A}') + Q^2 \mathbf{A}'^2 \Psi'. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Vamos agora calcular separadamente cada termo da equação (4.60):

$$\frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \Psi \right] = \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{iQ}{\hbar} \Psi \frac{\partial \zeta}{\partial t} \right); \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial \Psi'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \Psi \right] = \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{iQ}{\hbar} \Psi \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right); \quad (4.63)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi'}{\partial x^2} = \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2iQ}{\hbar} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{Q^2}{\hbar^2} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \Psi + \frac{iQ}{\hbar} \Psi \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right]. \quad (4.64)$$

Expressões análogas serão presentes quando considerarmos os eixos y e z . Assim, temos:

$$\nabla \Psi' = \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \left(\nabla \Psi + \frac{iQ}{\hbar} \Psi \nabla \zeta \right) \quad (4.65)$$

e

$$\nabla^2 \Psi' = \exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right) \left[\nabla^2 \Psi + \frac{2iQ}{\hbar} (\nabla\zeta \cdot \nabla\Psi) - \frac{Q^2}{\hbar^2} \Psi (\nabla\zeta)^2 + \frac{iQ}{\hbar} \Psi \nabla^2 \zeta \right]. \quad (4.66)$$

Como todos os termos da equação dependem linearmente de Ψ' ou de suas derivadas que, por sua vez, dependem linearmente com $\exp\left(\frac{iQ\zeta}{\hbar}\right)$, iremos negligenciá-los nos próximos resultados. Dessa forma,

$$\begin{aligned} i\hbar Q(2\mathbf{A}' \cdot \nabla\Psi') &= 2i\hbar Q(\mathbf{A} + \nabla\zeta) \cdot \nabla\Psi' \\ &= 2i\hbar Q\mathbf{A} \cdot \nabla\Psi - 2Q^2\Psi\mathbf{A} \cdot \nabla\zeta + 2i\hbar Q(\nabla\zeta \cdot \nabla\Psi) - 2Q^2\Psi(\nabla\zeta)^2, \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$i\hbar Q\nabla \cdot \mathbf{A}' = i\hbar Q\nabla \cdot (\mathbf{A} + \nabla\zeta) = \Psi\nabla \cdot \mathbf{A} + \Psi\nabla^2\zeta, \quad (4.68)$$

$$Q^2\mathbf{A}'^2\Psi' = Q^2\Psi'(\mathbf{A} + \nabla\zeta) \cdot (\mathbf{A} + \nabla\zeta) = Q^2\Psi\mathbf{A}^2 + 2Q^2\Psi\mathbf{A} \cdot \nabla\zeta + Q^2\Psi(\nabla\zeta)^2 \quad (4.69)$$

e

$$QV'\Psi' = \left(V - \frac{\partial\zeta}{\partial t}\right) \Psi' = QV\Psi - Q\Psi\frac{\partial\zeta}{\partial t}. \quad (4.70)$$

Substituindo (4.66), (4.67), (4.68), (4.69) e (4.70) em (4.60), somos deixados apenas com

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + \frac{i\hbar Q}{2m}(2\mathbf{A} \cdot \nabla\Psi + \Psi\nabla \cdot \mathbf{A}')\Psi + \frac{Q^2}{2m}\mathbf{A}^2\Psi + QV\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (4.71)$$

que preserva a mesma forma da equação (4.60). Desse modo, concluímos que a equação de Schrödinger é **invariante de calibre**. Usaremos esse fato a seguir, mas, antes, vamos reescrever a equação (4.57) de forma mais explícita:

Primeiramente, notemos que, ao contrairmos o índice i com o índice j (operador divergente) na derivada covariante,

$$\Gamma_{ik}^i = \frac{1}{2} (G^{im}\partial_i G_{km} + G^{im}\partial_k G_{mi} - G^{im}\partial_m G_{ik}) = \frac{1}{2} G^{im}\partial_k G_{im} = \frac{1}{2} \text{Tr}(G^{-1}\partial_k G)_{im}. \quad (4.72)$$

Usando a fórmula de Jacobi para uma matriz genérica $A = A(\beta)$ expressa como

$$\frac{1}{\det A(\beta)} \frac{d}{d\beta} \det A(\beta) = \frac{d}{d\beta} \ln(\det A(\beta)) = \text{Tr}\left(A^{-1}(\beta) \frac{d}{d\beta} A(\beta)\right), \quad (4.73)$$

obtemos, então,

$$\Gamma_{ik}^i = \frac{1}{2} \partial_k \ln(\det G_{ij}) = \frac{\partial \ln \sqrt{G}}{\partial q^k}. \quad (4.74)$$

Logo,

$$\nabla_i v^i = \partial_i v^i + \frac{\partial \ln \sqrt{G}}{\partial q^i} v^i = \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{G} v^i) \quad (4.75)$$

e

$$G^{ij}\nabla_i\nabla_j\Psi = \nabla_j\nabla^j\Psi = \nabla^2\Psi = \frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\Psi}{\partial q^j}\right), \quad (4.76)$$

onde usamos a operação de **elevação de índice** do Cálculo Tensorial, isto é $\nabla^i\Psi = G^{ij}\nabla_j\Psi$. Tal resultado está de acordo com o que já obtivemos em (4.3).

Agora, expandindo (4.57),

$$i\hbar D_0\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[G^{ij}\nabla_i\nabla_j\Psi - \frac{iQ}{\hbar}(2G^{ij}A_i\nabla_j\Psi + G^{ij}\Psi\nabla_iA_j) - \frac{Q^2}{\hbar^2}G^{ij}A_iA_j\Psi\right], \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} i\hbar D_0\Psi = & \frac{1}{2m}\left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\Psi}{\partial q^j}\right) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{G}G^{ij}A_j\right)\Psi\right] \\ & + \frac{1}{2m}\left[2iQ\hbar G^{ij}A_i\frac{\partial\Psi}{\partial q^j} + Q^2G^{ij}A_iA_j\Psi\right]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Seguindo os mesmos passos do procedimento descrito na seção anterior para o confinamento de uma partícula a determinada superfície mediante a aplicação de um potencial confinante $V_\lambda(q_3)$ (substituição da função de onda Ψ pela função separável χ e tomando o limite de $q_3 \rightarrow 0$),

$$\begin{aligned} i\hbar D_0\chi = & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial\chi}{\partial q^j}\right) - \frac{iQ}{\hbar\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^i}(\sqrt{g}g^{ij}A_j)\chi\right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{2iQ}{\hbar}g^{ij}A_i\frac{\partial\chi}{\partial q^j} - \frac{Q^2}{\hbar^2}(g^{ij}A_iA_j + A_3^2)\chi + \frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} - \frac{iQ}{\hbar}\left(\frac{\partial A_3}{\partial q_3}\right)\chi - \frac{2iQ}{\hbar}A_3\frac{\partial\chi}{\partial q_3}\right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{1}{2}\text{Tr}\alpha_{ij}\right)^2 - \det\alpha_{ij}\right]\chi + V_\lambda(q_3)\chi, \end{aligned} \quad (4.79)$$

onde destacamos novamente a presença do potencial geométrico.

Ao usarmos a separabilidade da nova função de onda $\chi(q_1, q_2, q_3, t)$ em uma parte normal $\chi_n(q_3, t)$ e em uma parte tangencial $\chi_t(q_1, q_2, t)$ tal como na seção anterior, perceberemos que a dinâmica da superfície $\mathcal{S}$ não pode ser **desacoplada** da dinâmica em q_3 devido ao termo $\frac{2iQ}{\hbar}A_3\frac{\partial\chi}{\partial q_3}$. Porém, felizmente ainda não utilizamos a invariância de calibre demonstrada previamente. Assim, para obtermos o desacoplamento, escolhemos a seguinte **fixação de calibre**:

$$\zeta = -\int_0^{q_3} A_3(q_1, q_2, z)dz. \quad (4.80)$$

Concluimos a partir disso que

$$A'_3 \rightarrow A_3 + \frac{\partial\zeta}{\partial q_3} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial A'_3}{\partial q_3} = 0. \quad (4.81)$$

Substituindo esses últimos resultados na equação (4.79), obtemos novamente duas equações desacopladas: a primeira delas é idêntica à equação (4.39) para a dinâmica no setor normal à superfície (ao qual não estamos interessados); a segunda, que representa a dinâmica na superfície, apresenta termos novos provenientes da interação com os campos eletromagnéticos e é escrita como [17]

$$i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) - \frac{iQ}{\hbar \sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} g^{ij} A_j) \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{2iQ}{\hbar} g^{ij} A_i \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} - \frac{Q^2}{\hbar^2} g^{ij} A_i A_j \chi_t \right] + V_S \chi_t + V_e \chi_t, \quad (4.82)$$

onde V_S é o potencial geométrico e V_e é a energia potencial de interação. Note que, quanto aos potenciais vetoriais, apenas as componentes A_1 e A_2 permanecem. Além disso, uma vez que passamos a adotar a convenção da soma de Einstein, não utilizamos somatórios novamente a despeito do que fora apresentado na equação (4.40).

Capítulo 5

Anel Mesoscópico Bidimensional com Anisotropia de Massa em Defeito Cônico

Neste capítulo, aplicaremos os conceitos introduzidos, as ferramentas matemáticas apresentadas e os resultados obtidos e discutidos ao longo do texto prévio visando ao objetivo final deste trabalho: determinar os efeitos da massa efetiva anisotrópica nas propriedades eletrônicas, na magnetização e na corrente persistente em um anel mesoscópico semiconductor com geometria cônica [10].

5.1 Massa Anisotrópica na Equação de Schrödinger

Na primeira seção do Capítulo 2 deste trabalho, apresentamos que era possível aproximar a relação de dispersão dos semicondutores nas bordas de suas respectivas bandas de condução por uma relação da forma

$$\epsilon(\mathbf{k}) \approx \epsilon_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu}, \quad (5.1)$$

válida quando a massa efetiva μ fosse isotrópica com ϵ_c sendo a energia mínima da banda de condução. Note que fizemos a substituição $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \frac{\mathbf{G}}{2} \rightarrow \mathbf{k}$. Tal relação de dispersão tem o mesmo formato para uma partícula livre sob influência apenas de um potencial constante ϵ_c . A equação de Schrödinger correspondente para tal aproximação é dada por

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + \epsilon_c \psi = \epsilon \psi. \quad (5.2)$$

Entretanto, como também vimos, os elétrons dos semicondutores em geral tais como SiC, GaN e CdS detêm massa efetiva anisotrópica[21], cujas relações de dispersão devem então ser generalizadas pela expressão [22]

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} k_\alpha \left(\frac{1}{\mu} \right)_\beta^\alpha k^\beta, \quad (5.3)$$

onde $\alpha, \beta = \{1, 2, 3\}$ ou, mais explicitamente,

$$\left(\frac{1}{\mu} \right)_\beta^\alpha = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon(k)}{dk_\alpha dk^\beta} \doteq \begin{pmatrix} m_{11}^{-1} & m_{12}^{-1} & m_{13}^{-1} \\ m_{21}^{-1} & m_{22}^{-1} & m_{23}^{-1} \\ m_{31}^{-1} & m_{32}^{-1} & m_{33}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

denominado como **tensor de massa efetiva**.

Um caso mais simples em semicondutores, ocorre quando consideramos um modelo para superfície de Fermi elipsoidal [19, 22] tal como ilustrado na Figura 2.3, ou seja,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} \right), \quad (5.5)$$

onde m_t e m_l são as chamadas **massas transversais** e **longitudinais** respectivamente. Então, de (5.3),

$$\left(\frac{1}{\mu} \right)_\beta^\alpha = \begin{pmatrix} m_t^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_t^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_l^{-1} \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Além disso, a equação de Schrödinger associada à relação de dispersão (5.5) será

$$\frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \epsilon_c \psi = \epsilon \psi. \quad (5.7)$$

Da última equação, podemos notar que a massa efetiva m_t está relacionada somente à parte superficial (plano xy), enquanto que a massa efetiva m_l está acoplada à parte normal (eixo z). A expressão (4.82) representa uma generalização da equação de Schrödinger para qualquer superfície curva que, por sua vez, também deve incluir o caso cartesiano (5.7). Durante o desenvolvimento de tal resultado em (4.31), é possível perceber que o potencial geométrico é o único remanescente da parte normal em (4.82) após o procedimento de separação das funções de onda normal χ_n e tangencial χ_t . Por outro lado, o termo entre parênteses em (5.7) é exatamente o caso particular cartesiano do operador $\mathcal{D}$ da parte superficial. Por conseguinte, podemos adaptar a equação de Schrödinger (4.82), levando-se

em conta as diferentes massas efetivas tal como feito [19, 42]:

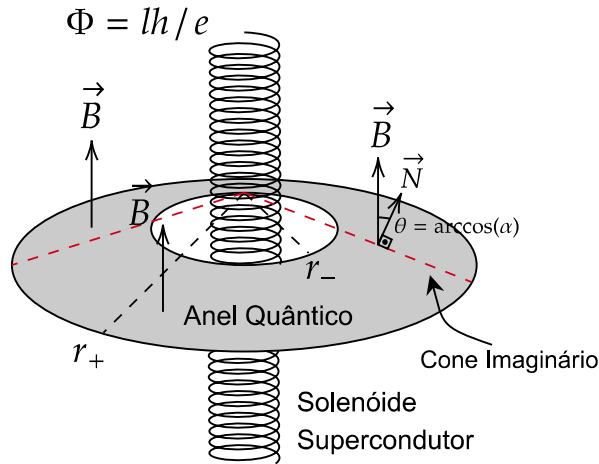
$$E\chi_t = -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) - \frac{iQ}{\hbar \sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} g^{ij} A_j) \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m_t} \left[-\frac{2iQ}{\hbar} g^{ij} A_i \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} - \frac{Q^2}{\hbar^2} g^{ij} A_i A_j \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m_l} (M^2 - K) \chi_t + V_e \chi_t. \quad (5.8)$$

Especificando Q como a carga do elétron $-e$, V_S como o potencial geométrico devido ao defeito cônico (4.54) e V_e como o potencial de Tan-Inkson (2.12), obtemos

$$E\chi_t = -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} \right) + \frac{ie}{\hbar \sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} g^{ij} A_j) \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{2ie}{\hbar} g^{ij} A_i \frac{\partial \chi_t}{\partial q^j} - \frac{e^2}{\hbar^2} g^{ij} A_i A_j \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m_l} \left[\frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right] \chi_t + \left(\frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - 2\sqrt{a_1 a_2} \right) \chi_t. \quad (5.9)$$

Antes de progredirmos em busca das auto-energias e autofunções, precisamos abordar novamente o potencial vetor usado no Capítulo 2 visando adequar sua forma ao contexto da geometria cônica, uma vez que a partir de agora o vetor normal à superfície $\mathbf{N}$ forma um ângulo $\theta = \arccos(\alpha)$ com o vetor de $\mathbf{B}$ (Figura 5.1).

Figura 5.1 – Esquematização do Problema em Geometria Cônica



O campo magnético externo uniforme e o vetor normal da superfície não são mais paralelos. Além disso, o parâmetro r passa a medir a distância entre um ponto da superfície e a ponta do cone imaginário (mesma posição da origem da superfície sem curvatura). Fonte: Próprio autor.

Vamos definir $\mathbf{A}_1$ como o sendo potencial vetor associado ao campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ externo ao solenoide e $\mathbf{A}_2$ como sendo aquele responsável pelo fluxo AB no

solenóide. Dessa forma, o potencial vetor total do sistema $\mathbf{A}$ fica expresso como

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2. \quad (5.10)$$

Para o potencial vetor $\mathbf{A}_1$, o mesmo deve satisfazer a seguinte relação obtida pela aplicação do **teorema de Stokes** na definição de fluxo magnético:

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_1 \cdot d\mathbf{l} = \int \mathbf{B} \cdot \mathbf{N} d\sigma, \quad (5.11)$$

onde $\mathcal{C}$ representa um contorno circular ao longo do anel, $\mathbf{N}$ é o vetor normal unitário à superfície obtido em (4.47) e $d\sigma = \sqrt{g} du dv = \alpha r dr d\varphi$ é o elemento de área. De (3.57) e (3.58), $d\mathbf{l} = \alpha r d\varphi \hat{\varphi}$. Então,

$$\begin{aligned} A_1 \alpha r \oint_{\mathcal{C}} d\varphi &= B \alpha^2 \int_0^{2\pi} \int_0^r r' dr' d\varphi, \\ \mathbf{A}_1 &= \frac{B \alpha r}{2} \hat{\varphi} = \frac{B}{2} \hat{e}_{\varphi}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Agora, para o potencial vetor $\mathbf{A}_2$, devemos lembrar que o mesmo não é capaz de gerar campo magnético fora do solenóide de forma que se tomarmos um circuito fechado que se estenda até a superfície do anel, o fluxo total através da área compreendida deve continuar a ser Φ_{AB} . Assim,

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_2 \cdot d\mathbf{l} = \Phi_{AB}, \quad (5.13)$$

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_2 \cdot d\mathbf{l} = \alpha r A_2 \int_0^{2\pi} d\varphi = (2\pi \alpha r) A_2 = \Phi_{AB}, \quad (5.14)$$

$$\mathbf{A}_2 = \frac{\Phi_{AB}}{2\pi \alpha r} \hat{\varphi} = \frac{\Phi_{AB}}{2\pi \alpha^2 r^2} \hat{e}_{\varphi}. \quad (5.15)$$

Portanto, nosso novo potencial vetor $\mathbf{A}$ será [43]

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 = \left(\frac{B}{2} + \frac{\Phi_{AB}}{2\pi \alpha^2 r^2} \right) \hat{e}_{\varphi} = \left(\frac{B \alpha r}{2} + \frac{\Phi_{AB}}{2\pi \alpha r} \right) \hat{\varphi}, \quad (5.16)$$

de modo que, para $\alpha = 1$ e $\Phi_{AB} = lh/e$, obtemos novamente os resultados prévios do Capítulo 2.

5.2 Auto-energias e Autofunções

Expandindo (5.9) seguindo a forma do tensor métrico (4.45) e usando o potencial vetor obtido em (5.16),

$$\begin{aligned}
E\chi_t = & -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \chi_t}{\partial r} \right) + \frac{1}{\alpha^2 r^2} \frac{\partial^2 \chi_t}{\partial \varphi^2} + \frac{2ie}{\hbar} \left(\frac{B}{2} + \frac{l\phi_0}{2\pi\alpha^2 r^2} \right) \frac{\partial \chi_t}{\partial \varphi} \right] \\
& + \frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{e^2}{4\hbar^2} \left(B^2 \alpha^2 r^2 + \frac{2Bl\phi_0}{\pi} + \frac{l^2 \phi_0^2}{\alpha^2 \pi^2 r^2} \right) \chi_t \right] - \frac{\hbar^2}{2m_l} \left[\frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right] \chi_t \\
& + \left(\frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - 2\sqrt{a_1 a_2} \right) \chi_t.
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Reorganizando os termos com fatores comuns,

$$\begin{aligned}
E\chi_t = & -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \chi_t}{\partial r} \right) - \frac{e^2 B^2 \alpha^2 r^2}{4\hbar^2} + \frac{1}{\alpha^2 r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right)^2 \chi_t + \frac{ieB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right) \chi_t \right] \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_l} \left[\frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right] \chi_t + \left(\frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - 2\sqrt{a_1 a_2} \right) \chi_t.
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Supondo novamente o ansatz $\chi_t(r, \varphi) = C e^{-im\varphi} f(r)$,

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df}{dr} - \left\{ \left[\frac{2m_t a_2}{\hbar^2} + \frac{e^2 B^2 \alpha^2}{4\hbar^2} \right] r^2 + \frac{1}{r^2} \left[\frac{2m_t a_1}{\hbar^2} + \frac{(m-l)^2}{\alpha^2} - \frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2} \frac{m_t}{m_l} \right] \right\} f(r) \\
- \left\{ \left[\frac{eB(m-l)}{\hbar} + \frac{2m_t(E+V_0)}{\hbar^2} \right] - \frac{m_t(1-\alpha)}{m_l \alpha r} \delta(r) \right\} f(r) = 0.
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Definindo

$$\begin{aligned}
\left[\frac{2m_t a_2}{\hbar^2} + \frac{e^2 B^2 \alpha^2}{4\hbar^2} \right] &= \frac{1}{4\lambda^4}, \quad L = \sqrt{\frac{2m_t a_1}{\hbar^2} + \frac{(m-l)^2}{\alpha^2} - \frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2} \frac{m_t}{m_l}} \\
\text{e} \quad S^2 &= \left[\frac{eB(m-l)}{\hbar} + \frac{2m_t(E+V_0)}{\hbar^2} \right]
\end{aligned} \tag{5.20}$$

com $\lambda = \sqrt{\hbar/m_t \omega}$, podemos então reescrever a equação diferencial compactamente da forma

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df}{dr} - \left\{ \frac{r^2}{4\lambda^4} + \frac{L^2}{r^2} - S^2 + \frac{m_t(1-\alpha)}{m_l \alpha r} \delta(r) \right\} f(r) = 0. \tag{5.21}$$

A presença da função **delta de Dirac** na equação radial anterior implica na existência de soluções irregulares devido à singularidade na origem. De acordo com a discussão apresentada em [44], as soluções irregulares de (5.21) irão contribuir para a função de onda radial somente se o operador hamiltoniano (5.17) não for **auto-adjunto**. Comparando a equação hipergeométrica obtida em [44] com aquela que obtivemos em (2.36) e associando com a equação radial anterior, pode-se concluir que o hamiltoniano não será auto-adjunto

se $|L| < 1$ [10]. Entretanto, para os valores do parâmetro α e da razão entre as massas efetivas a serem utilizados em posterior análise, observa-se $L \gg 1$, de forma que podemos ignorar a influência da função delta e considerarmos somente soluções regulares em $r = 0$ tal como em [10].

Fazendo uma mudança de variável $r \rightarrow \lambda\sqrt{2x}$ similar a feita no Capítulo 2, buscaremos por uma solução $f(x)$ da forma

$$f(x) = Nx^{1/2}e^{-x/2}h(x), \quad (5.22)$$

desde que $h(x)$ satisfaça a equação hipergeométrica

$$x\frac{d^2h}{dx^2} + [(L+1) - x]\frac{dh}{dx} - Kh(x) = 0, \quad (5.23)$$

sendo $K = \frac{(L+1)}{2} - \frac{\lambda^2 S^2}{2}$ de forma que admitirá soluções finitas apenas quando $K = -n$. Desse modo, obtemos as auto-energias:

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{L}{2}\right)\hbar\omega - \frac{(m-l)}{2}\hbar(\alpha\omega_c) - \frac{m_t}{4}\omega_0^2 r_0^2, \quad (5.24)$$

onde

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 + (\alpha\omega_c)^2}, \quad \text{com} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{m_t}} \quad \text{e} \quad \omega_c = \frac{eB}{m_t}. \quad (5.25)$$

A partir dos últimos resultados nos quais destacamos o termo $\alpha\omega_c$, podemos compreender que o parâmetro de curvatura α tenderá a modular a influência do campo magnético B . De fato, para $\alpha \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow \omega_0$. Tal conclusão faz bastante sentido, pois à medida que a superfície vai sendo deformada, o fluxo de B através da mesma se torna cada vez menor. Entretanto, é importante ressaltar que α ainda produzirá efeitos sobre o momento angular efetivo L .

Ao longo das análises posteriores, iremos estabelecer fixamente que $\alpha = 0,99995$. Uma vez que α representa um déficit angular, seu efeito linear no anel será da ordem de $4\text{\AA}$, valor similar às constantes de rede para alguns cristais semicondutores como GaAs ($5,65\text{\AA}$) e SiC ($4,35\text{\AA}$). Dessa forma, podemos entender tal valor como correspondente à remoção de uma única fileira radial do cristal.

A correspondência imediata entre a equação diferencial (2.36) e a equação diferencial (5.23) resulta nas autofunções normalizadas

$$\psi_{n,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\Gamma(L+n+1)}{2^{L+1}\pi(\Gamma(L+1))^2 n!}} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^L e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2} {}_1F_1\left(-n, L+1, \frac{1}{2}(r/\lambda)^2\right) e^{-im\varphi}, \quad (5.26)$$

com ${}_1F_1$ novamente representando a função hipergeométrica confluyente introduzida em (2.38).

Tendo as expressões para as auto-energias e autofunções, é necessário agora esclarecermos a relação entre as massas m_t e m_l antes de prosseguirmos para a análise numérica. Primeiramente, vamos definir que as massas transversais e longitudinais podem ser expressas em função da massa efetiva do elétron μ no GaAs como

$$m_t = \sigma\mu \quad \text{e} \quad m_l = \beta\mu. \quad (5.27)$$

Dessa forma, a razão entre as massas R pode ser escrita como

$$R = \frac{m_t}{m_l} = \frac{\sigma}{\beta}. \quad (5.28)$$

Nosso objetivo é encontrar relações para os coeficientes σ e β de modo que possamos analisar diferentes casos anisotrópicos em função apenas de R , mas que, ao mesmo tempo, assegure um vínculo consistente com o caso isotrópico*. Para isso, considere as relações de dispersão (5.1) e (5.5) fixando $\epsilon_c = 0$ por conveniência. É fácil concluir que as superfícies de energia constante no espaço recíproco para essas duas expressões serão esférica e elipsoidal, respectivamente.

Se cada uma dessas relações representam situações distintas com suas respectivas energias de Fermi E_{fi} e E_{fa} **antes de formada a heterojunção**, podemos descrever o volume dos estados ocupados no espaço recíproco para o caso isotrópico $\mathcal{V}_{iso}$ e caso anisotrópico $\mathcal{V}_{anis}$ como

$$\mathcal{V}_{iso} = \frac{4}{3}\pi k_f^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2E_{fi}}{\hbar^2}\right)^{3/2} \mu^{3/2} \quad \text{e} \quad \mathcal{V}_{anis} = \frac{4}{3}\pi abc = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2E_{fa}}{\hbar^2}\right)^{3/2} m_l^{1/2} m_t, \quad (5.29)$$

onde

$$a = b = \sqrt{\frac{2m_t E_{fa}}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad c = \sqrt{\frac{2m_l E_{fa}}{\hbar^2}} \quad (5.30)$$

correspondem aos semi-eixos do elipsoide. Igualando os volumes em (5.29),

$$E_{fi}^{3/2} \mu^{3/2} = E_{fa}^{3/2} m_l^{1/2} m_t. \quad (5.31)$$

*Por exemplo, $R = 1$ deve representar o caso isotrópico com $\sigma = \beta = 1$. Entretanto, existem outros infinitos pares de valores para σ e β que satisfariam tal condição, aos quais devemos evitar.

Em seguida, exigindo a igualdade entre as energias de Fermi dos casos isotrópico e anisotrópico e lançando mão de (5.27), obtemos a seguinte condição para os coeficientes σ e β :

$$\sigma^2\beta = 1. \quad (5.32)$$

Dessa forma, garante-se que, para $R = 1$, $\sigma = \beta = 1$. Além disso, em termos da razão R , podemos rescrevê-los como

$$\sigma = R^{1/3} \quad \text{e} \quad \beta = R^{-2/3}. \quad (5.33)$$

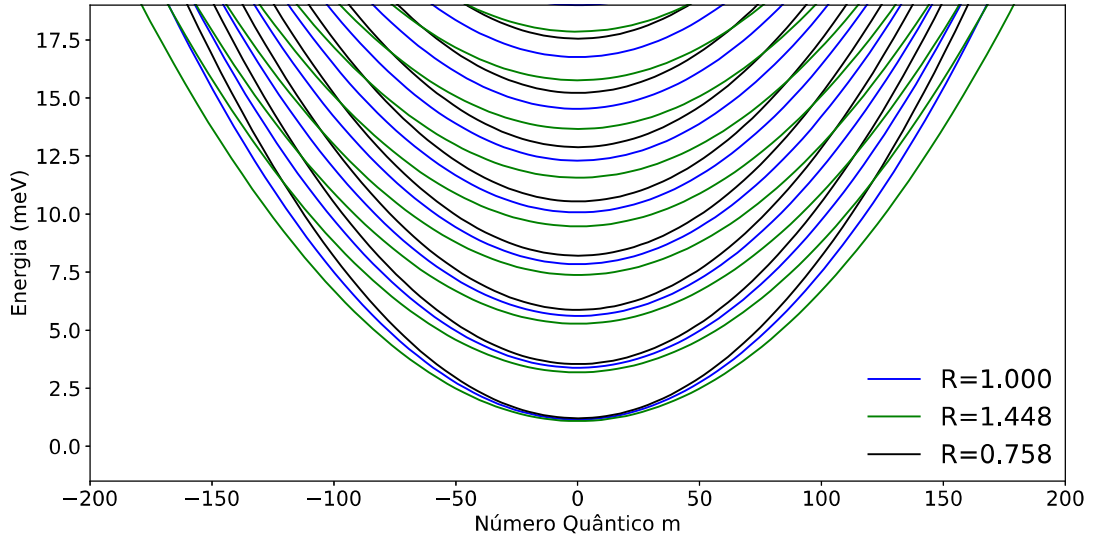
O fato de mantermos inalterados o volume e a energia de Fermi durante o processo de passagem do sistema isotrópico para o anisotrópico resolveu a questão relacionada à indeterminação de σ e β conforme desejávamos. Outra consequência não óbvia de tal procedimento é a manutenção no número de estados ocupados (ou portadores) constante. De fato, o número de estados ocupados $N_{anis}^\dagger$ na amostra anisotrópica que possui um **volume no espaço físico** V é dado pela razão entre o volume total ocupado no espaço recíproco $\mathcal{V}$ dividido pelo volume da célula primitiva rede recíproca, ou seja, o volume ocupado por cada estado. Para determinar tal quantidade, deve-se resolver a equação de Schrödinger para o poço quadrado (agora retangular) infinito tridimensional com anisotropia descrita pelo tensor de massa efetiva (5.6). Seguindo um procedimento muito similar ao descrito em [22], concluímos:

$$N_{anis} = \frac{\mathcal{V}_{anis}}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{\mathcal{V}_{iso}}{\frac{8\pi^3}{V}} = N_{iso}, \quad (5.34)$$

Lembre-se que não estamos considerando o spin das partículas. Portanto, o número total de elétrons é **conservado**. Tal resultado é muito importante pelo fato de nos permitir utilizar diferentes valores de R e manter o mesmo número de elétrons $N_e = 1400$ do gás bidimensional isotrópico estudado nos artigos [9, 10]. Em outras palavras, antes da formação da heteroestrutura, cada sistema anisotrópico permanecerá com a mesma energia de Fermi inicial e concentração de elétrons do caso isotrópico, de modo que não precisaremos nos preocupar com os efeitos nas propriedades físicas do sistema decorrentes da variação um parâmetro termodinâmico extensivo como N_e .

[†]Note que o número ao qual estamos nos referindo aqui representa a quantidade de elétrons na amostra antes de ser formada a heteroestrutura.

Figura 5.2 – Sub-bandas de Energia em Campo Magnético Nulo para Diferentes Razões Anisotrópicas



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.7$. Fonte: Próprio autor.

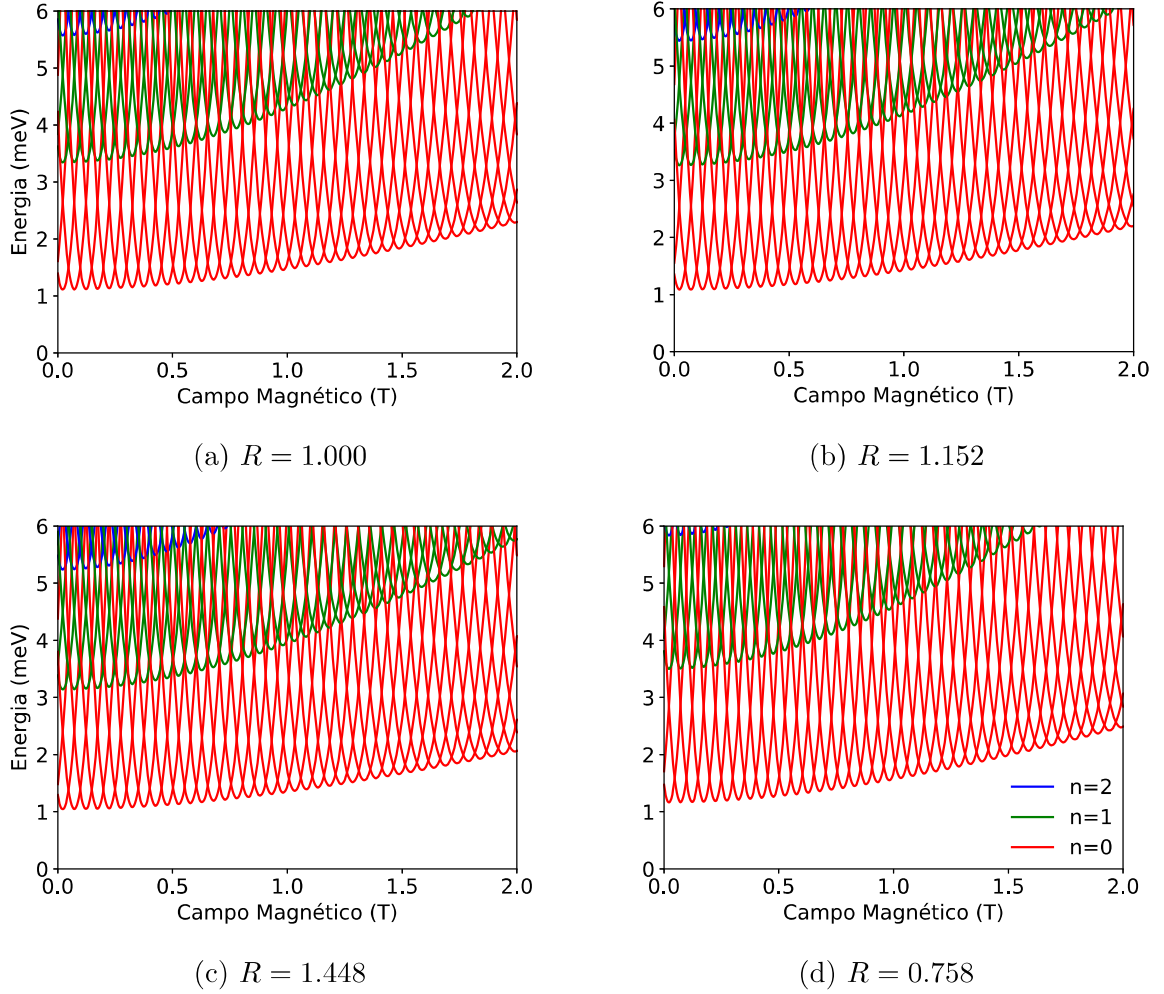
Na figura acima, apresentamos graficamente os efeitos da anisotropia nas sub-bandas de energia para o caso $B = 0$, considerando $l = 0$, $\alpha = 0,99995$ e diferentes razões entre massas efetivas $R = m_t/m_l$, onde é possível notar que os valores de R utilizados correspondem àqueles introduzidos na Tabela 2.2 referente a alguns semicondutores reais. A partir do gráfico, constata-se claramente duas consequências principais:

- As sub-bandas com $R < 1$ se achatam horizontalmente, enquanto que aquelas para as quais $R > 1$ se expandem em relação ao caso $R = 1$. Isso implicará que, no primeiro caso, os elétrons serão obrigados a se acomodar em estados mais energéticos para um mesmo m em relação aos demais; situação oposta ao que ocorrerá no segundo caso.
- À medida que os níveis aumentam, os mínimos das sub-bandas com diferentes valores de R passam a se afastar cada vez mais. As sub-bandas com $R < 1$ se deslocam positivamente em relação à $R = 1$, enquanto que àquelas com $R > 1$ se deslocam negativamente.

Como vimos ao comparar os gráficos das Figuras 2.10 e 2.12 no Capítulo 2, a fronteira entre regiões com diferentes valores de n , ou seja, que possuem cores distintas como

apresentado na figura abaixo, representam a posição dos mínimos das sub-bandas em função de B com $l = 0$:

Figura 5.3 – Comportamento das Sub-bandas em Função do Campo Magnético para Diferentes Razões Anisotrópicas.



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

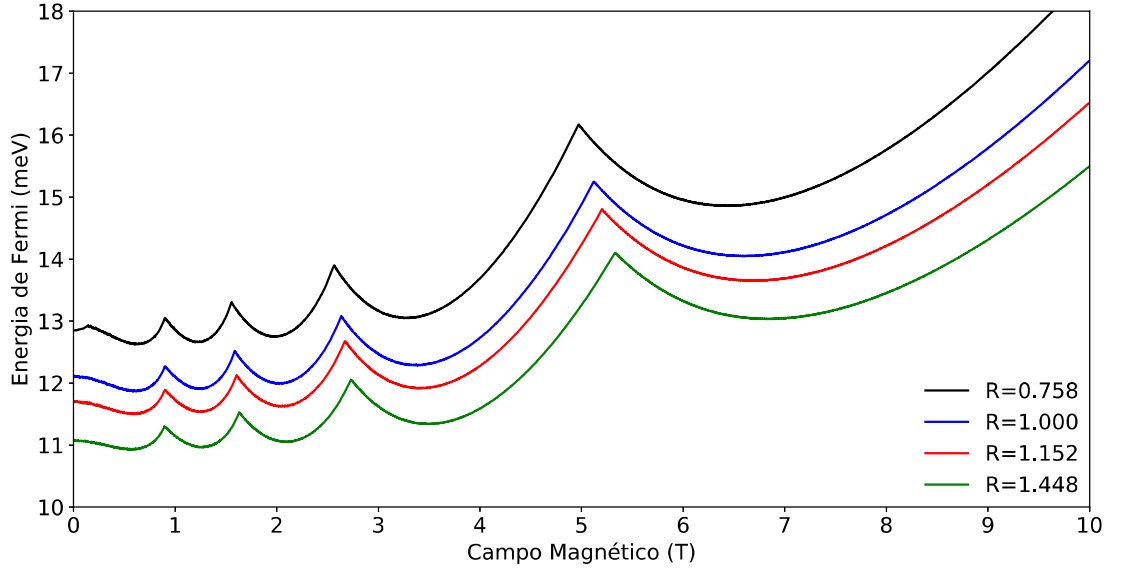
Dessa forma, podemos concluir que o comportamento de afastamento demonstrado pelas sub-bandas em função de R também se mantem para campos magnéticos não nulos.

5.3 Energia de Fermi e Espessura do Anel Quântico

O fato de tanto os mínimos quanto as espessuras das sub-bandas serem afetadas pela anisotropia terá impacto direto sobre a energia de Fermi do sistema. Como os elétrons do caso $R < 1$ tendem a ocupar estados mais energéticos para um mesmo valor de m em

relação aos demais, a contribuição total advinda de todos os estados ocupados fará com que a energia de Fermi total seja sempre superior como demonstrado abaixo. O oposto valerá para o caso $R > 1$.

Figura 5.4 – **Energia de Fermi para Diferentes Razões Anisotrópicas**



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$ à fluxo magnético nulo. Fonte: Próprio autor.

Um aspecto interessante do gráfico anterior é o de que os picos de oscilações da energia de Fermi são deslocados para a esquerda à medida que R diminui. A explicação se deve à relação entre os picos e a despopulação completa das sub-bandas como discutido no Capítulo 2; uma vez que a distância entre os mínimos das sub-bandas aumenta com a intensidade de B e com a diminuição de R , a despopulação completa das sub-bandas ocorrerá de forma mais rápida, o que antecipará o surgimento dos picos de energia em função do campo magnético.

Na subseção 2.2.5 do Capítulo 2, fora apresentada a definição para a espessura de um anel quântico. Em tal ocasião, foi citado que a espessura nada mais seria do que a região classicamente acessível a um conjunto de N_e partículas com energia de Fermi E_f sob a influência do potencial radial de Tan-Inkson (2.9). Entretanto, na presença do defeito cônico, foi mostrado que um potencial de caráter atrativo em relação à ponta imaginária do anel cônico surgia. Assim, pode-se afirmar que neste caso as partículas estarão sujeitas

a um potencial radial resultante dado por

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - 2\sqrt{a_1 a_2} - \frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{(1 - \alpha^2)}{4\alpha^2 r^2}. \quad (5.35)$$

A região classicamente acessível ao conjunto de partículas dada uma energia de Fermi E_f será fornecida pelas soluções da equação

$$E_f = \frac{1}{r^2} \left[a_1 - \frac{\hbar^2}{8m_l} \frac{(1 - \alpha^2)}{\alpha^2} \right] + a_2 r^2 - V_0, \quad (5.36)$$

onde $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$. Tal equação de quarto grau pode ser reduzida a uma do segundo grau cujas soluções a serem obtidas para os raios interno r_- e externo r_+ do anel serão

$$r_{\pm} = \left(\frac{E_f + V_0 \pm \sqrt{E_f^2 + 2E_f V_0 + \frac{\hbar^2 a_2 (1 - \alpha^2)}{2m_l \alpha^2}}}{2a_2} \right)^{1/2}. \quad (5.37)$$

Efetuando um procedimento análogo ao mostrado a partir da equação (2.66), obtém-se a seguinte expressão para a espessura do anel quântico com defeito e anisotropia de massa:

$$\Delta r = r_+ - r_- = r_0 \left[\frac{2E_f}{V_0} + 2 \left(1 - \sqrt{1 - R \frac{(1 - \alpha^2)}{\alpha^2} \left(\frac{\hbar \omega_0}{4V_0} \right)^2} \right) \right]^{1/2}, \quad (5.38)$$

onde $V_0 = \frac{1}{4} \omega_0^2 r_0^2 \approx 1992,22 \text{ meV}$.

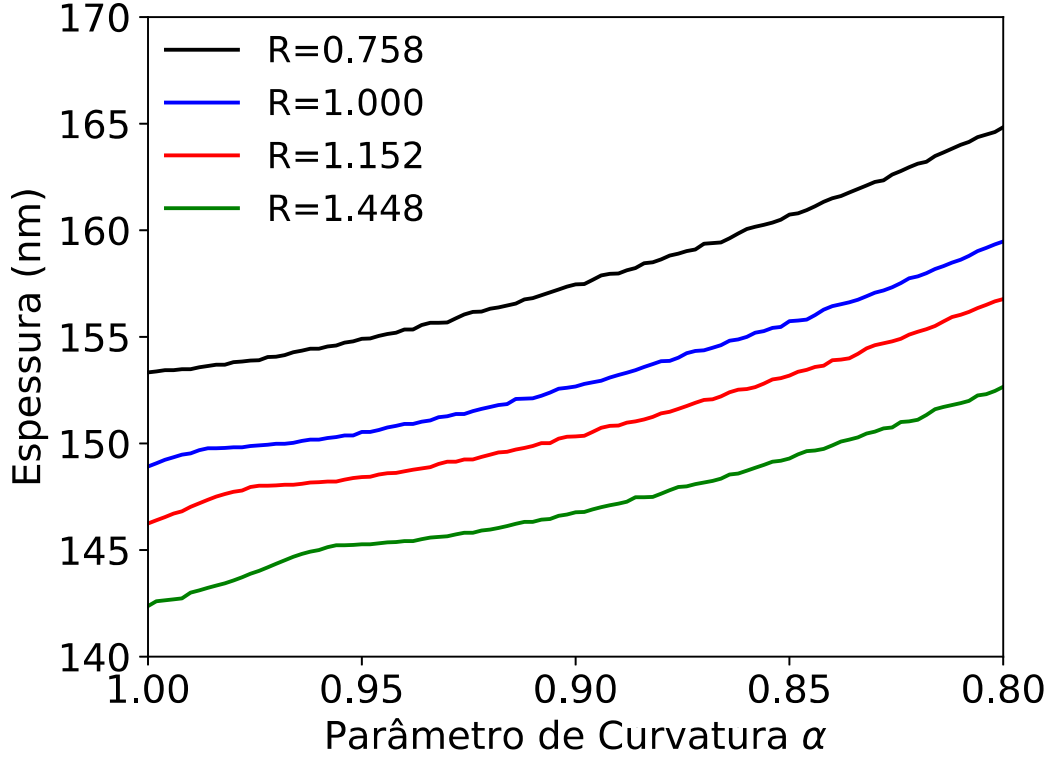
Para o caso em que $m_t = m_l$ e $\alpha = 0,9$, obtém-se que

$$\Delta r \approx 153 \text{ nm} \quad (5.39)$$

é a nova espessura do anel quântico quando há um defeito cônico de grau $\alpha = 0,9$. Tal resultado é maior que a espessura de 149 nm para o caso em que não há defeito e isso faz sentido por duas razões: em primeiro lugar, como constatado em [10], as sub-bandas são mais estreitas quando o defeito cônico aumenta (similar ao efeito da massa anisotrópica já mostrado na Figura 5.2), o que força os elétrons a ocuparem estados mais energéticos, aumentando a energia de Fermi do sistema; com a inclusão da anisotropia, tal efeito é intensificado. Em segundo lugar, é possível aferir na expressão (5.36) que o termo envolvendo o defeito é responsável por atenuar a repulsividade interna do potencial de Tan-Inkson e, portanto, o poço deverá ser menos íngreme próximo à origem, fazendo com que elétrons, para uma dada energia de Fermi, consigam ocupar estados energéticos mais próximos do centro do anel. Entretanto, o termo dependente explicitamente de α

em (5.38) terá influência desprezível devido ao pequeno valor de $\hbar\omega_0/4V_0$. Na Figura 5.5, apresentamos o comportamento da espessura do anel quântico em função de α para diferentes razões anisotrópicas, onde podemos constatar que a espessura aumenta à medida que α e R diminuem.

Figura 5.5 – Variação da Espessura do Anel para Diferentes Valores de α



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV e $r_0 = 1350$ nm.

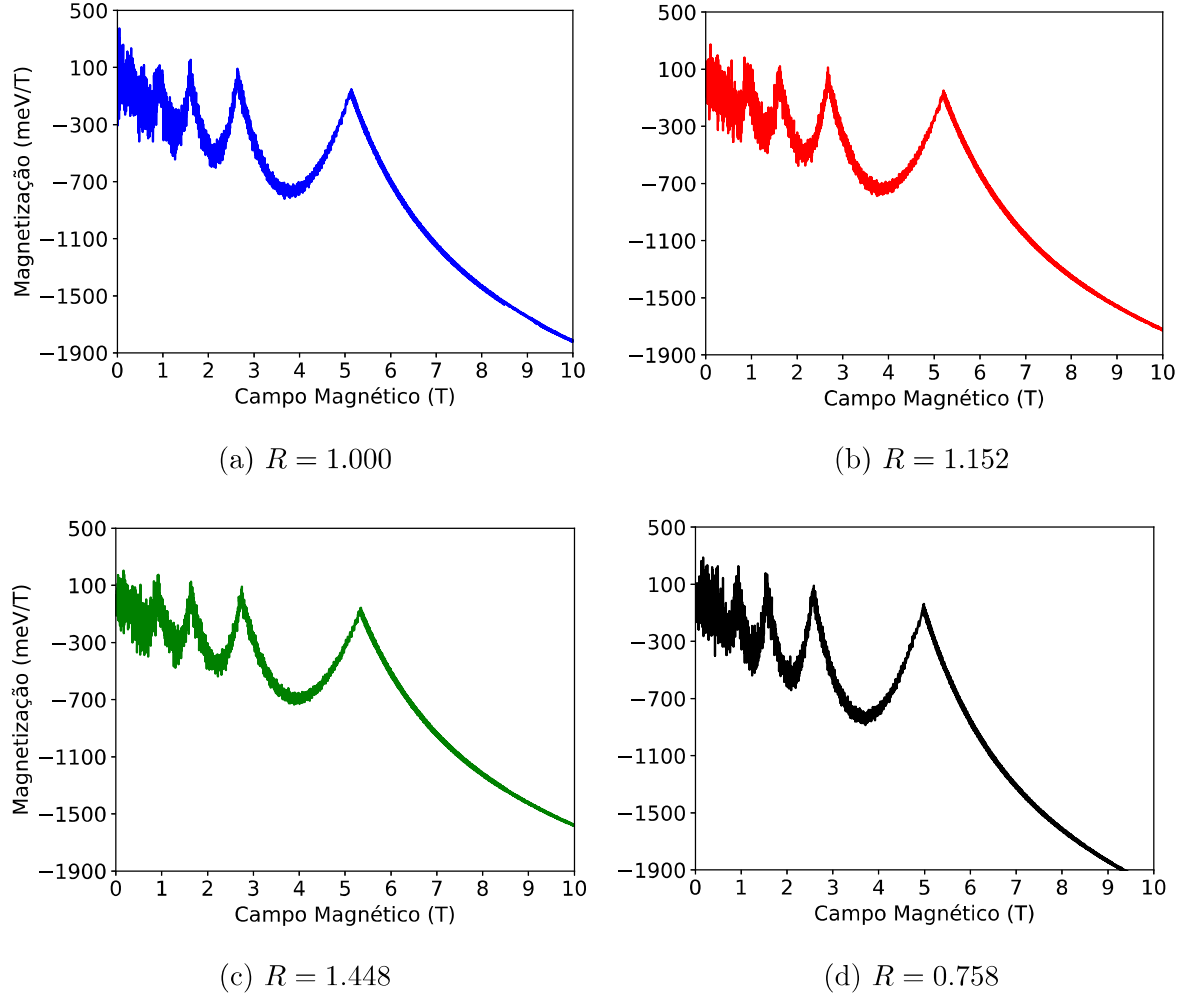
Fonte: Próprio autor.

5.4 Magnetização

Usando a definição (2.81) e o resultado (5.24), podemos novamente determinar a expressão para a magnetização por estado, agora modificada para levar em conta a curvatura e anisotropia:

$$\mathcal{M}_{n,m} = -\frac{e\hbar\alpha}{m_t} \left[\left(n + \frac{1}{2} + \frac{L}{2} \right) \frac{\alpha\omega_c}{\omega} - \frac{m-l}{2} \right]. \quad (5.40)$$

Figura 5.6 – Magnetização do Sistema para Diferentes Razões Anisotrópicas e $\alpha = 0,99995$.



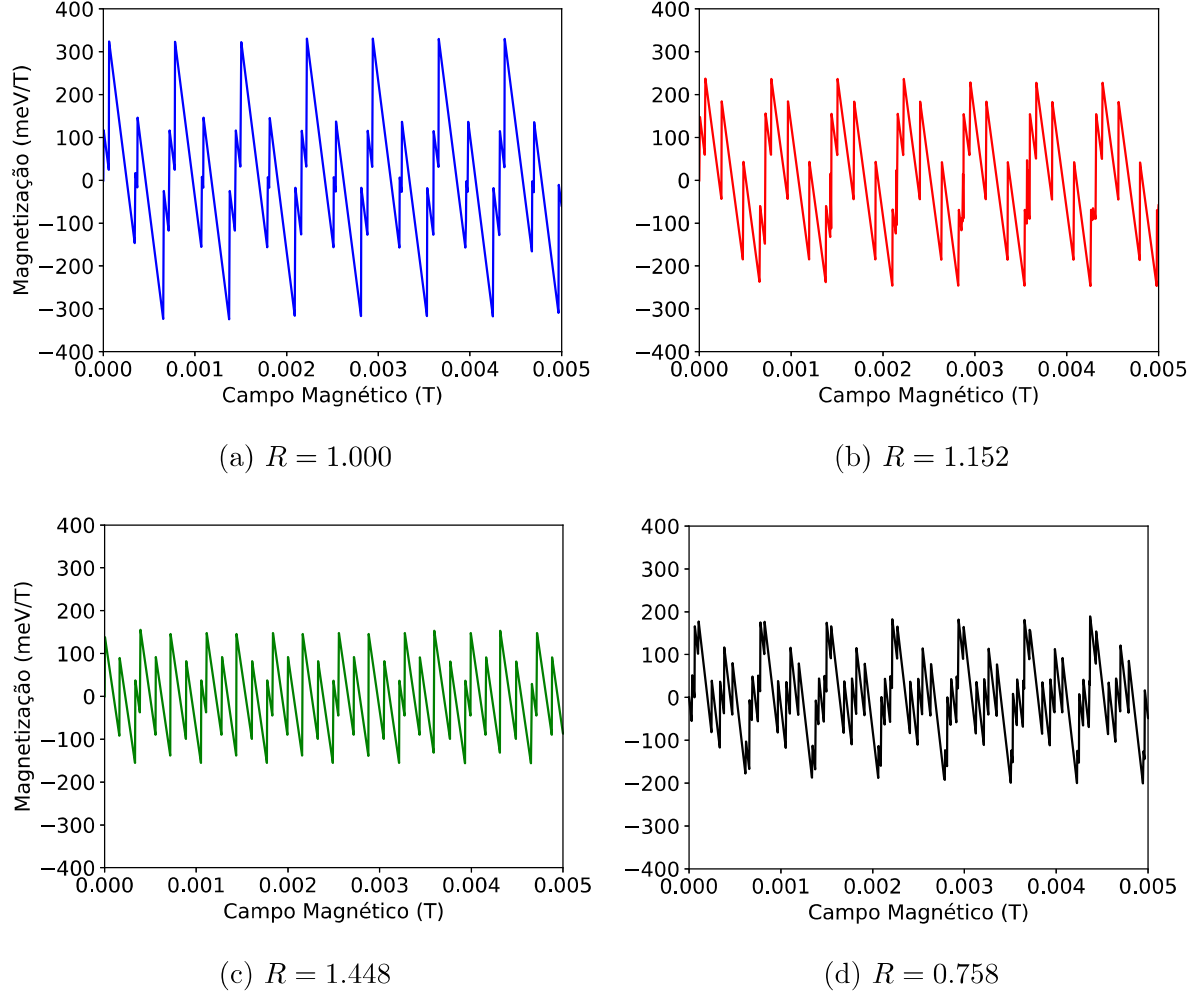
O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

Para obtermos a magnetização total do sistema em função do campo magnético aplicado, devemos seguir o mesmo procedimento descrito no Capítulo 2, isto é, somar os valores das magnetizações correspondentes a todos os 1400 estados ocupados com energia inferior a de Fermi para determinado valor de B e fluxo magnético igual à zero. Porém, como mostrado na seção anterior, tanto a curvatura como a anisotropia afetam o comportamento da energia de Fermi, de modo que devemos levar tal influência em consideração.

Na Figura 5.6, são apresentados os resultados obtidos numericamente acerca do comportamento da magnetização total do sistema em função do campo magnético considerando um valor fixo de $\alpha = 0,99995$ e diferentes valores de anisotropia em acordo com

a Tabela 2.2. Pode-se perceber novamente o domínio das oscilações de Haas-van Alphen com o aumento do campo magnético. Além disso, podemos notar que as oscilações dHvA possuem maiores amplitudes e decaem mais rápido após o último pico à medida R diminui.

Figura 5.7 – **Magnetização no Regime de Campos Magnéticos Fracos para Diferentes Razões Anisotrópicas e $\alpha = 0,9995$.**



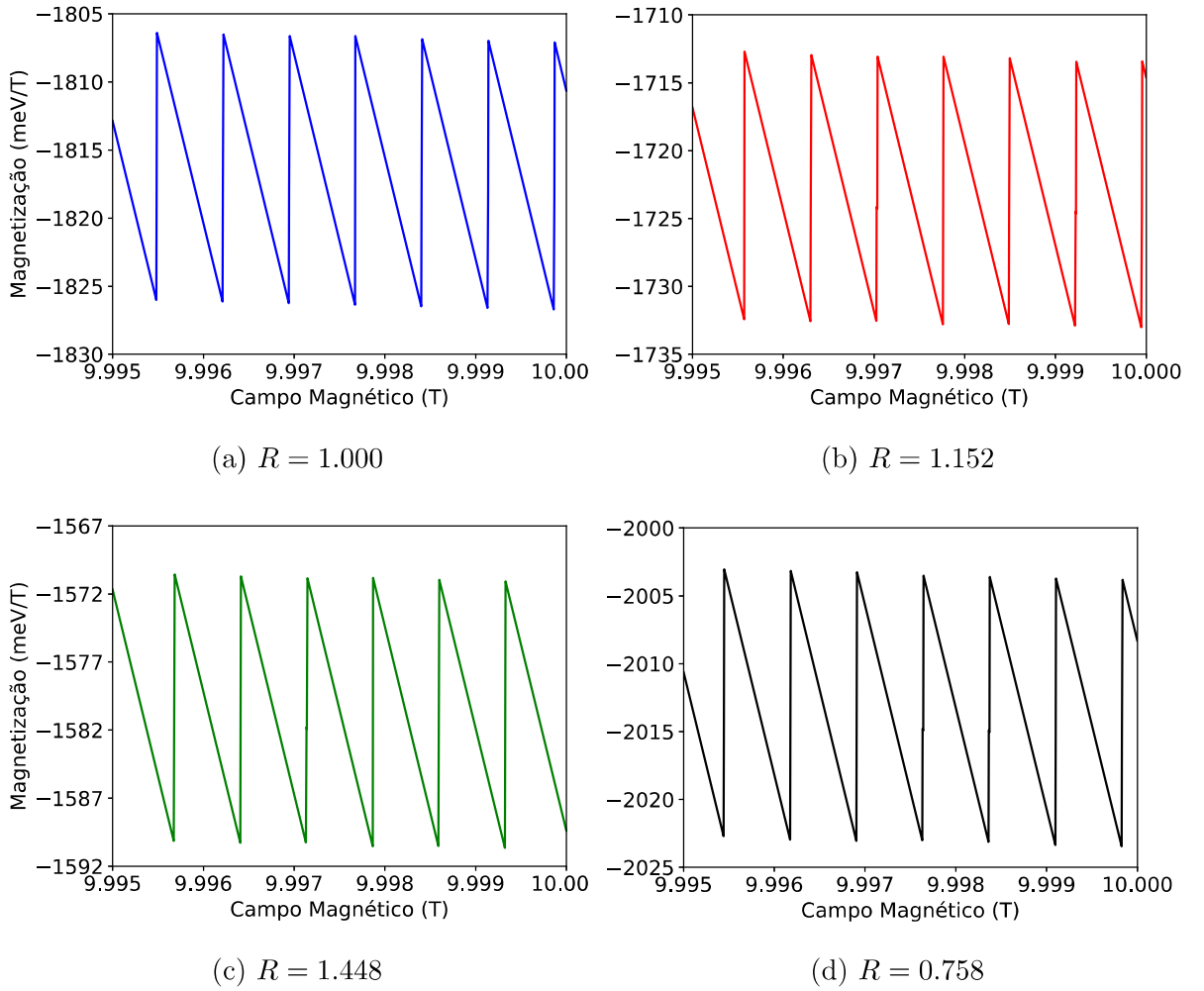
O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

Tal padrão pode ser explicado pelo fato de que os picos das magnetizações se localizam nos mesmos pontos dos picos referentes a energia de Fermi (ver Capítulo 2) e que as oscilações dHvA são muito dependentes da ocupação das sub-bandas, relacionada também ao comportamento da energia de Fermi.

No regime de **campos magnéticos fracos**, temos novamente a presença de fortes oscilações Aharonov-Bohm devido a intensa alternância dos estados com a variação de B ,

relacionada ao fato do número de bandas ocupadas nessa faixa ser máximo. Entretanto, podemos aferir através da Figura 5.7 que tanto a amplitude como o comportamento das oscilações são afetados pela anisotropia, onde a variação do valor de R em relação à 1 tende a comprimir a amplitude das oscilações de tal forma que, para $R = 1,448$, pode-se afirmar que a frequência das oscilações máximas foi dobrada.

Figura 5.8 – **Magnetização no Regime de Campos Magnéticos Fortes para Diferentes Razões Anisotrópicas e $\alpha = 0,99995$.**



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

No regime de **campos magnéticos fortes** (Figura 5.8), as oscilações AB ainda se fazem presentes, todavia suas amplitudes são fortemente suprimidas pelas oscilações dHvA e adquirem um perfil do tipo dente de serra pois, em tal faixa, apenas a sub-banda de menor energia está ocupada. Percebe-se também que, como já pontuado nesta seção, os

valores absolutos da magnetização se tornam cada vez mais negativos à medida que R diminui, embora a amplitude das oscilações não varie apreciavelmente.

5.5 Correntes Persistentes

Na Figura 5.9, é apresentado o comportamento das corrente persistente em função do campo magnético para diferentes valores de R . Os gráficos foram obtidos através da relação de Byers-Yang apresentada no Capítulo 2, dessa vez com E_n dada por (5.24):

$$I_{n,m} = \frac{e\omega}{4\pi} \left(\frac{m-l}{\alpha^2 L} - \frac{\alpha\omega_c}{\omega} \right) \quad (5.41)$$

A corrente resultante será contabilizada a partir do somatório da contribuição I_{nm} referente a cada estado ocupado para um dado B e $l = 0$. Nota-se novamente a presença de oscilações do tipo AB através de toda a faixa de campo magnético. Tais oscilações se mostram intensas para campos fracos, mas são suprimidas à medida que B vai aumentando. Diferentemente da magnetização, não há a presença de oscilações do tipo dHvA. Ademais, é possível constatar que as oscilações têm menor amplitude para valores de R mais distantes de 1.

Analogamente ao que fora feito para o cálculo do raio médio de estado r_m em (2.56) quando na ausência de curvatura e anisotropia,

$$r_m = \sqrt{2L}\lambda. \quad (5.42)$$

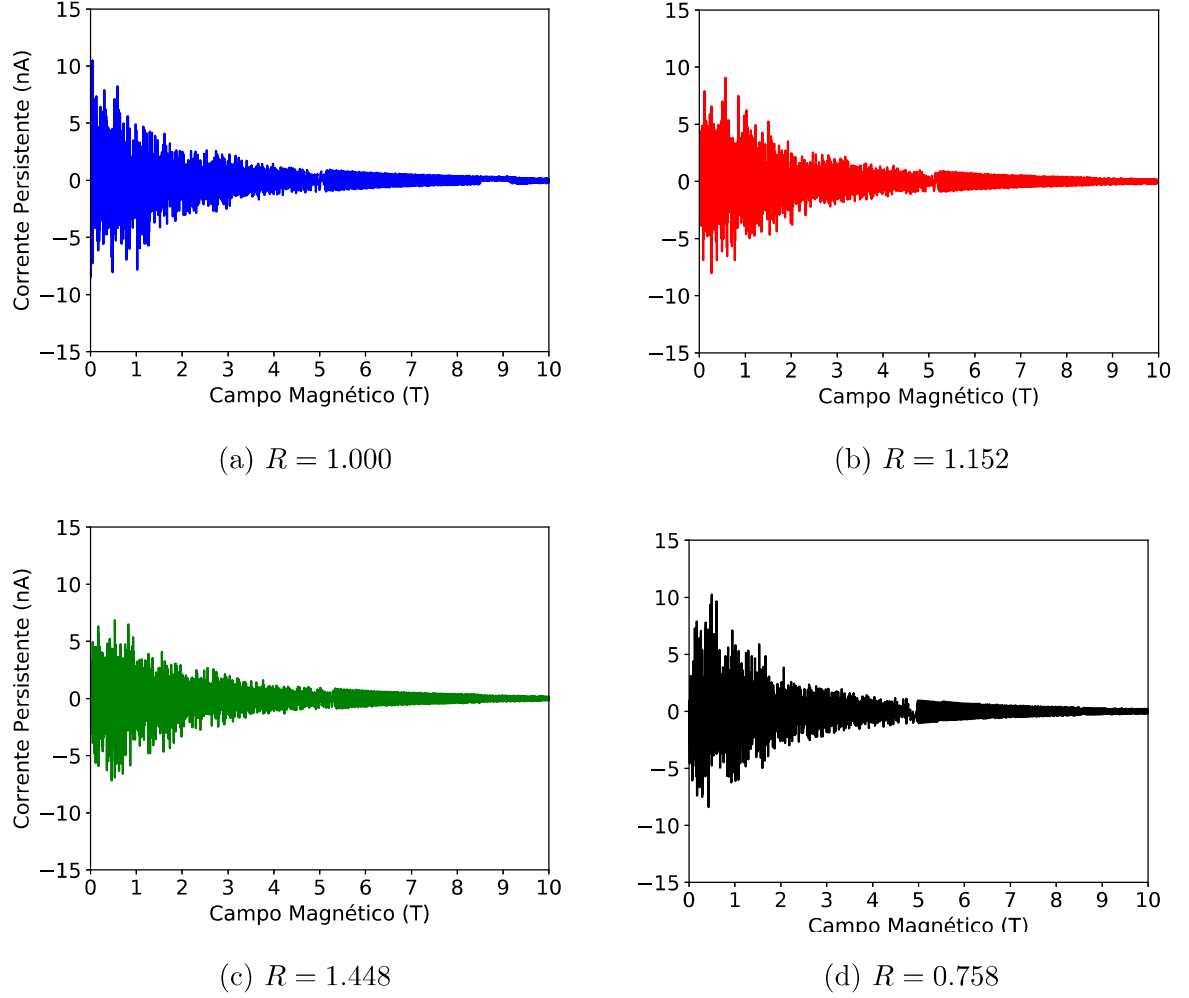
Dessa forma, reescrevendo a magnetização por estado como

$$\mathcal{M}_{nm} = \alpha \left\{ \pi r_{nm}^2 I_{nm} - \frac{e\hbar}{\mu R^{1/3}} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\alpha\omega_c}{\omega} - \left(\frac{m-l}{2} \right) \left(\frac{1-\alpha^2}{\alpha^2} \right) \right] \right\}, \quad (5.43)$$

obtemos uma relação de entre a magnetização e a corrente persistente, onde o termo de curvatura α e a razão anisotrópica R passam a figurar. Note que podemos facilmente retornar à expressão obtida no Capítulo 2 fixando $\alpha = 1$ e $R = 1$.

No limite para o qual $\omega_c \ll \omega_0$ (campo magnético fraco), os comportamentos de ambas as quantidades se diferem somente por um termo de proporcionalidade $\alpha\pi r_{nm}^2$, onde o efeito de curvatura é desprezível por estarmos assumindo $(1 - \alpha^2) \ll 1$. De

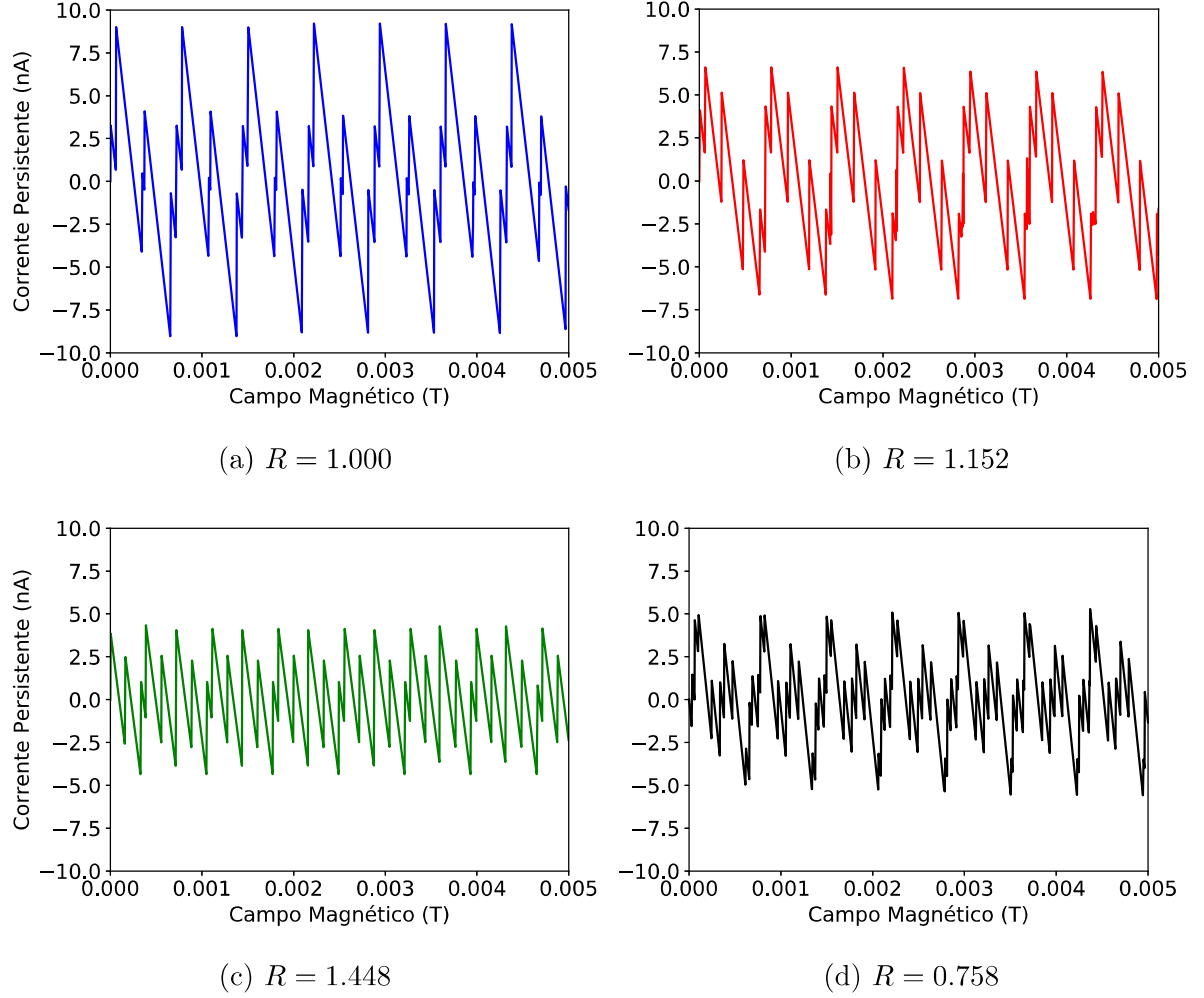
Figura 5.9 – Corrente Persistente para Diferentes Razões Anisotrópicas e $\alpha = 0,99995$.



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

fato, tal afirmação pode ser constatada ao compararmos os gráficos da magnetização para campos fracos na Figura 5.7 com os gráficos para a corrente persistente apresentados na Figura 5.10, onde novamente se observa a presença de fortes oscilações Aharonov-Bohm com o parâmetro de anisotropia determinando maiores amplitudes de oscilação para valores mais próximos de 1.

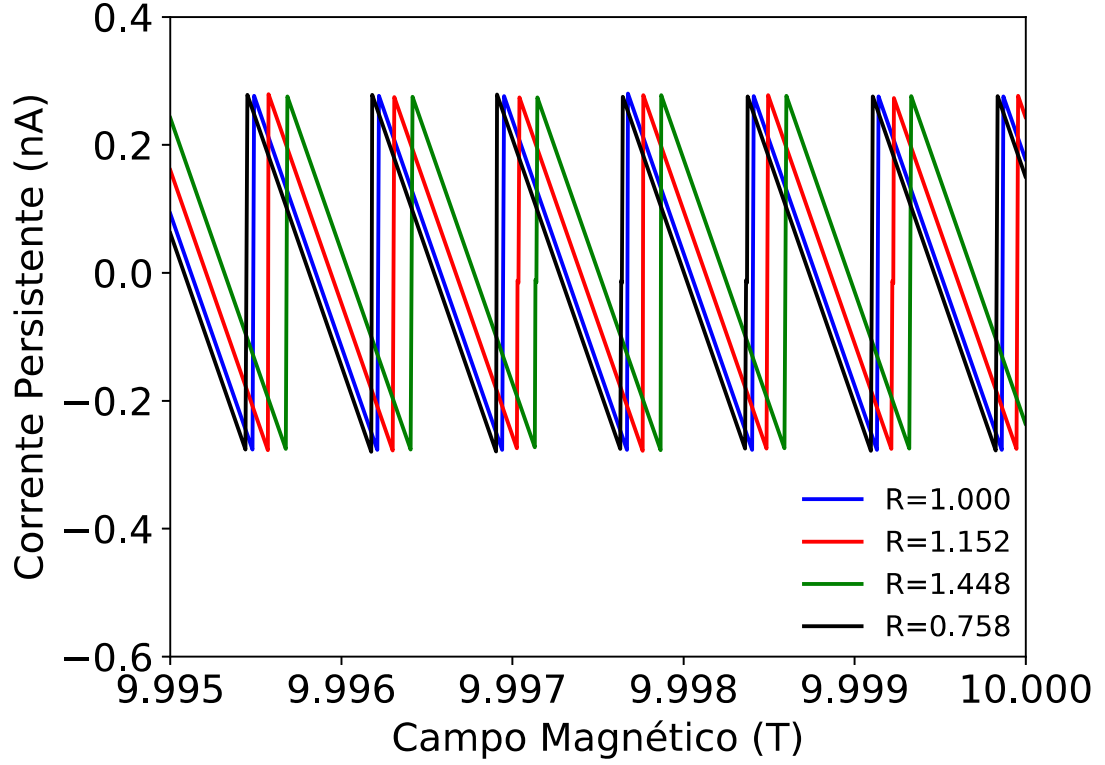
Figura 5.10 – **Correntes Persistentes no Regime de Campos Magnéticos Fracos para Diferentes Razões Anisotrópicas e $\alpha = 0,99995$.**



O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

No regime de campos magnéticos fortes, as oscilações de corrente apresentam o mesmo perfil dente de serra visto para a magnetização. A amplitude das oscilações não varia apreciavelmente com R , entretanto há uma defasagem de fase que ocorre para a esquerda ($R < 1$) ou para direita ($R > 1$) como evidenciado na Figura 5.11.

Figura 5.11 – Correntes Persistentes no Regime de Campos Magnéticos Fortes para Diferentes Razões Anisotrópicas

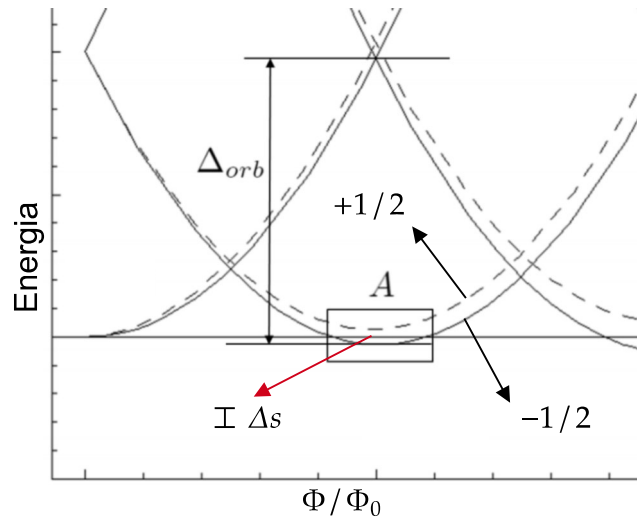


O gráfico apresentado se refere a um sistema com parâmetros $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV, $r_0 = 1350$ nm e $\alpha = 0.99995$. Fonte: Próprio autor.

5.6 Efeitos no *Gap* Orbital

Como apresentado na Introdução deste texto, os anéis quânticos são considerados candidatos promissores a funcionarem como *qubits*. Apesar do fato de serem sistemas controláveis e que fornecem um sistema de dois níveis quando se considera o spin (ver Figura abaixo), um dos principais desafios da Computação Quântica é desenvolver um sistema com *qubits* estáveis, isto é, que se mantenham perante influências externas de campos eletromagnéticos e variações de temperatura.

Figura 5.12 – Sistema de Anel Quântico Unidimensional com Spin

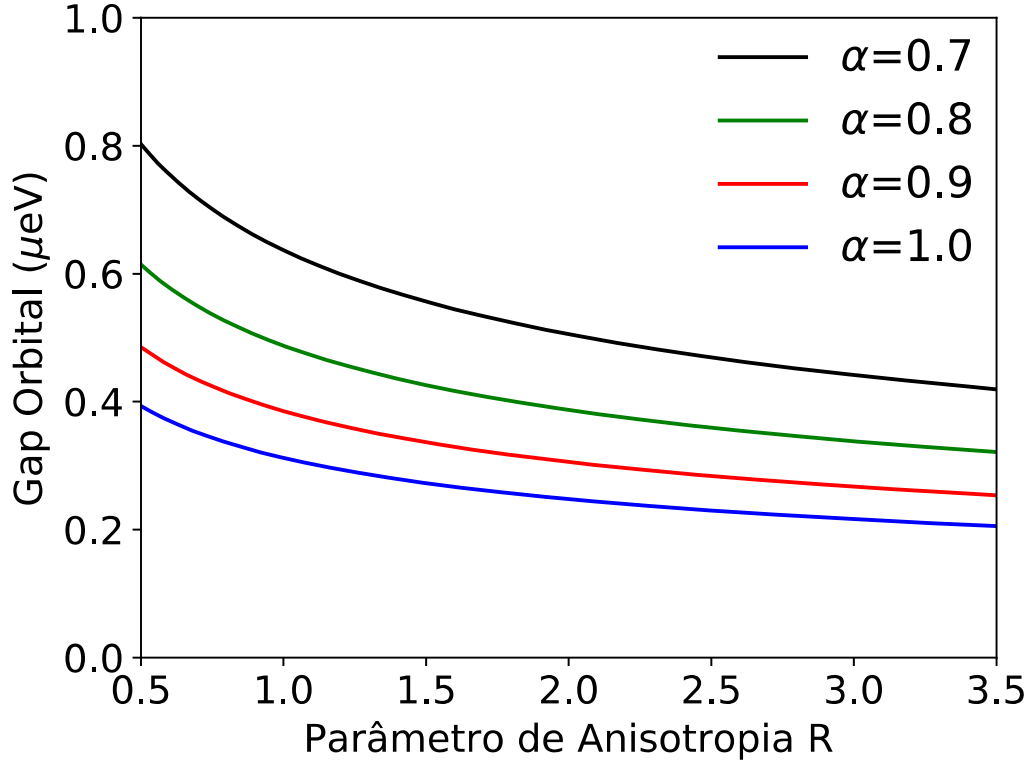


Fonte: Referência [12].

Para que tal objetivo possa ser atingido em nosso contexto, é interessante que o **gap de spin** Δ_s seja bem menor do que o **gap de orbital** Δ_{orb} [12]. Isso permitirá que o dispositivo possa ser exposto a agentes externos sem afetar o sistema de dois níveis tão facilmente.

Analisando a diferença de energia máxima entre o elétron no estado fundamental e o primeiro estado excitado, obtemos o seguinte comportamento mostrado na Figura (5.13) para o *gap* orbital em função da anisotropia, levando-se diferentes intensidades de curvatura submetida na superfície do anel quântico:

Figura 5.13 – Comportamento do *Gap* Orbital em Função de R para Diferentes Valores de α



Os parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 2.23R^{-1/6}$ meV e $r_0 = 1350$ nm. Fonte: Próprio autor.

Constata-se claramente que o parâmetro de anisotropia R pode influenciar de forma considerável o valor do *gap* orbital e que tal influência se torna maior à medida que a curvatura aumenta. Além disso, percebe-se uma tendência de aumento em Δ_{orb} com a redução de R , o que, a princípio, promoveria uma maior estabilidade ao *qubit*.

Capítulo 6

Considerações Finais

Neste trabalho, investigou-se os efeitos que a inclusão de uma massa efetiva anisotrópica em um gás de elétrons bidimensional confinado a um anel quântico com geometria cônica acarreta à determinadas propriedades físicas do sistema. Tal estudo se mostrou necessário devido a escassez na Literatura de abordagens teóricas envolvendo anéis quânticos nas quais a anisotropia de massa efetiva, característica de muitos materiais semicondutores, é levada em consideração, o que pode ser justificado, em parte, pela dificuldade de se lidar com superfícies de Fermi mais complexas, em vez de uma superfície esférica.

Com base nisso, optou-se por analisar um cenário em que a superfície de Fermi do gás de elétrons fosse mais próxima do caso isotrópico: uma superfície de Fermi elipsoidal, ou seja, quando a massa efetiva dos elétrons da banda de condução pode assumir dois valores distintos denominados de massa efetiva transversal e massa efetiva longitudinal. Tal situação é capaz de representar a relação entre as massas efetivas em semicondutores comuns tais como ZnO, SiC e AlN, dos quais se extraíram os respectivos valores de R utilizados para a análise numérica. Entretanto, por se tratar de um estudo comparativo acerca da influência de tal fator nas propriedades do sistema e pela Literatura carecer de trabalhos experimentais que considerem gases de elétrons confinados em anéis quânticos com anisotropia elipsoidal, considerou-se necessário propor um novo modelo de abordagem no qual se impõe a referida anisotropia ao semiconductor isotrópico GaAs, buscando preservar a quantidade de elétrons da amostra utilizada no pioneiro estudo experimental publicado por D. Maily et. al em 1993 [7] do qual se basearam numerosos trabalhos realizados nos anos posteriores [8, 10], fornecendo assim uma conexão razoável entre análise

numérica de um modelo teórico e os resultados experimentais já reportados.

Como já adiantado, o objetivo principal deste trabalho foi o de esclarecer se a anisotropia afeta, de forma apreciável na escala usual, as propriedades físicas do sistema e descrever qualitativamente como as alterações se comportam quando o parâmetro de anisotropia R é modulado. Para isso, foram analisados os comportamentos de aspectos importantes do sistema tais como a sub-bandas de energia e seus mínimos energéticos bem como a energia de Fermi, onde foi claramente notado que essas quantidades são inversamente proporcionais à R . Além disso, buscou-se também comparar os comportamentos de grandezas macroscópicas do sistema como a magnetização e corrente persistente total com a variação da anisotropia nas quais se observou que as amplitudes AB iniciais diminuem com o módulo da variação R em relação ao caso isotrópico. Por outro lado, foi detectado que a espessura, a frequência das oscilações AB e as amplitudes das oscilações dHvA aumentam com a redução de R . Ainda, foi observado que a anisotropia não exerce influência sobre os padrões e amplitudes das oscilações AB em campos magnéticos fortes, apenas deslocando as respectivas fases para a direita ou esquerda a depender da variação de R . Por fim, obteve-se que o *gap* orbital, importante parâmetro no campo de aplicações em *qubits*, pode ter seu valor controlado a partir do parâmetro de anisotropia: seu módulo cresce à medida que R e α diminuem.

Dado o exposto, pode-se afirmar através dos resultados apresentados que a anisotropia de massa efetiva afeta apreciavelmente propriedades físicas importantes do sistema. Apesar dos valores das massas efetivas utilizadas não serem numericamente correspondentes aos semicondutores anisotrópicos reais, a proporção entre eles é a mesma, de modo que os efeitos qualitativos observados ainda se mantêm válidos. Além disso, espera-se que os avanços de técnicas em engenharia dos materiais possibilitem a manipulação da anisotropia de massa efetiva em cristais de forma a torná-la um fator importante para o aprimoramento tecnológico de tais estruturas.

Apêndice A

Energia de Fermi em um Ponto Quântico

O objetivo desta seção é encontrar uma expressão para a energia de Fermi em um ponto quântico que contém N elétrons sem spin, onde N é um número par. Isso seria bem interessante, uma vez que o número de elétrons é uma quantidade razoável de ser obtida experimentalmente.

Podemos afirmar que o ponto quântico é um caso particular de um anel quântico que possui raio interno nulo ou, em outras palavras, $a_1 = 0$ no potencial de Tan-Inkson. As consequentes auto-energias deste sistema na ausência de campo magnético serão, de acordo com (2.43),

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} \right) \hbar\omega_0. \quad (\text{A.1})$$

A energia de Fermi E_f é o maior valor energético acessível aos N elétrons. Rescrevendo (A.1) como

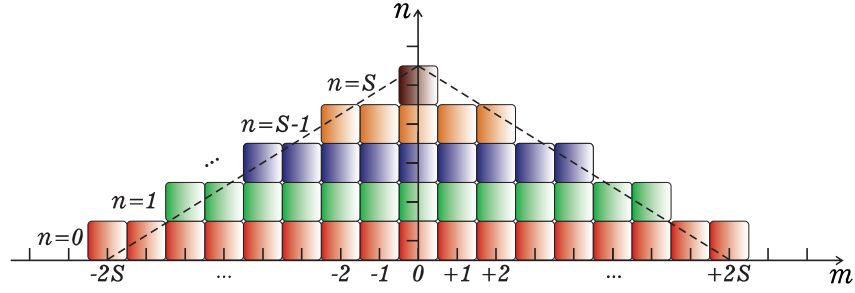
$$S = \frac{E_f}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} = n + \frac{|m|}{2}, \quad (\text{A.2})$$

podemos perceber que em um plano bidimensional $n \times m$, onde cada estado é representado por um quadrado de área 1×1 , o gás de elétrons irá formar um triângulo de base $-2S$ até $2S$ e altura $S + 1$ (pois devemos contar o estado fundamental) tal como mostra a Figura A.1.

Dessa forma, se cada quadrado é ocupado por somente um estado, podemos relacionar a área total do triângulo com o número de elétrons através da relação.

$$2S(S + 1) = N \rightarrow S^2 + S - \frac{N}{2} = 0. \quad (\text{A.3})$$

Figura A.1 – Ocupação de Estados no espaço $n \times m$ para um Ponto Quântico



Cada um dos N estados é representado por um quadrado rachurado de área igual a 1. Fonte: Próprio autor.

A única solução física dessa equação do segundo grau será

$$S = \frac{E_f}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} = \frac{\sqrt{2N+1}}{2} - \frac{1}{2}. \quad (\text{A.4})$$

Portanto,

$$E_f = \frac{\sqrt{2N+1}}{2} \hbar\omega_0. \quad (\text{A.5})$$

Podemos determinar $\hbar\omega_0$ a partir da relação de espessura do anel quântico (2.70).

Assim, obtemos

$$\hbar\omega_0 = \frac{4\hbar^2 \sqrt{2N+1}}{\mu \Delta r^2}, \quad (\text{A.6})$$

onde a espessura do anel quântico Δr é uma quantidade obtida experimentalmente.

Portanto, para um ponto quântico de GaAs contendo 1400 elétrons sem spin e espessura $\Delta r = 725$ nm,

$$\hbar\omega_0 \approx 0.458 \text{ meV} \quad \text{e} \quad E_f \approx 12.12 \text{ meV}, \quad (\text{A.7})$$

valores muito próximos aos utilizados em [9].

Apêndice B

Operadores Vetoriais em Coordenadas Curvilíneas

O objetivo desta seção é obter a forma dos operadores vetoriais válida para superfície com geometria cônica, que serão úteis em algumas partes do texto.

- **Gradiente**

Começemos pelo operador gradiente. Considere uma função escalar f . Em determinado sistema curvilíneo definido pelas coordenadas x^1 , x^2 e x^3 , o operador gradiente deve possuir a seguinte forma:

$$\nabla f = f_1 \hat{x}_1 + f_2 \hat{x}_2 + f_3 \hat{x}_3, \quad (\text{B.1})$$

onde f_1 , f_2 e f_3 ainda precisam ser determinados. Sendo f uma função que pode ser descrita em tal sistema de coordenadas, pela regra da cadeia,

$$df = \frac{\partial f}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial f}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial f}{\partial x^3} dx^3. \quad (\text{B.2})$$

Além disso, é conhecido que a expressão $df = \nabla f \cdot d\mathbf{r}$ é válida para qualquer sistema de coordenadas. Logo, usando isso em (B.2) com a definição (3.63) do elemento vetorial de linha $d\mathbf{r}$ em termo dos fatores de escala h_i , teremos

$$(f_1 \hat{x}_1 + f_2 \hat{x}_2 + f_3 \hat{x}_3) \cdot (h_1 dx^1 \hat{x}_1 + h_2 dx^2 \hat{x}_2 + h_3 dx^3 \hat{x}_3) = \frac{\partial f}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial f}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial f}{\partial x^3} dx^3, \quad (\text{B.3})$$

$$h_1 f_1 dx^1 + h_2 f_2 dx^2 + h_3 f_3 dx^3 = \frac{\partial f}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial f}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial f}{\partial x^3} dx^3. \quad (\text{B.4})$$

Portanto,

$$f_1 = \frac{1}{h_1} \frac{\partial f}{\partial x^1}, \quad f_2 = \frac{1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial x^2} \quad \text{e} \quad f_3 = \frac{1}{h_3} \frac{\partial f}{\partial x^3}. \quad (\text{B.5})$$

Assim, temos que o gradiente é expresso em coordenadas curvilíneas como

$$\nabla f = \frac{1}{h_1} \frac{\partial f}{\partial x^1} \hat{x}_1 + \frac{1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial x^2} \hat{x}_2 + \frac{1}{h_3} \frac{\partial f}{\partial x^3} \hat{x}_3. \quad (\text{B.6})$$

• Divergente

Seja $\mathbf{F}$ um campo vetorial que pode ser expresso no sistema de coordenadas curvilíneas como $\mathbf{F} = F_1 \hat{x}_1 + F_2 \hat{x}_2 + F_3 \hat{x}_3$. Usando a identidade vetorial $\nabla \cdot (\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla \cdot \mathbf{B}$, então

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \nabla \cdot (F_1 \hat{x}_1) + \nabla \cdot (F_2 \hat{x}_2) + \nabla \cdot (F_3 \hat{x}_3). \quad (\text{B.7})$$

Antes de prosseguirmos, devemos aferir de (B.6) que $\hat{x}_i = h_i \nabla x^i$ e, dessa forma, $\hat{x}_1 = \hat{x}_2 \times \hat{x}_3 = h_2 h_3 \nabla x^2 \times \nabla x^3$. Desse modo, lançando mão da identidade $\nabla \cdot (a \mathbf{A}) = a(\nabla \cdot \mathbf{A}) + \nabla a \cdot \mathbf{A}$, temos que, para a primeira parcela de (B.7),

$$\nabla \cdot (F_1 \hat{x}_1) = h_2 h_3 F_1 \nabla \cdot (\nabla x^2 \times \nabla x^3) + (\nabla x^2 \times \nabla x^3) \cdot \nabla (h_2 h_3 F_1), \quad (\text{B.8})$$

onde, pela identidade $\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$,

$$\nabla \cdot (\nabla x^2 \times \nabla x^3) = \nabla x^3 \cdot \nabla \times \nabla x^2 - \nabla x^2 \cdot \nabla \times \nabla x^3 = 0. \quad (\text{B.9})$$

Logo,

$$\nabla \cdot (F_1 \hat{x}_1) = \frac{1}{h_2 h_3} \hat{x}_1 \cdot \left(\frac{1}{h_i} \frac{\partial F_1}{\partial x^i} (h_2 h_3) \hat{x}_i \right) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x^1} (h_2 h_3 F_1). \quad (\text{B.10})$$

Analogamente para as outras parcelas de (B.7),

$$\nabla \cdot (F_2 \hat{x}_2) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x^2} (h_1 h_3 F_2) \quad \text{e} \quad \nabla \cdot (F_3 \hat{x}_3) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x^3} (h_1 h_2 F_3). \quad (\text{B.11})$$

Portanto,

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial x^1} (h_2 h_3 F_1) + \frac{\partial}{\partial x^2} (h_1 h_3 F_2) + \frac{\partial}{\partial x^3} (h_1 h_2 F_3) \right]. \quad (\text{B.12})$$

- **Laplaciano**

Para o cálculo do operador Laplaciano de uma função escalar f tal que $\mathbf{F} = \nabla f$, basta tomarmos o divergente de $\mathbf{F}$. Assim,

$$\nabla^2 f = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial x^1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial f}{\partial x^1} \right) + \frac{\partial}{\partial x^2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial f}{\partial x^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x^3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial f}{\partial x^3} \right) \right]. \quad (\text{B.13})$$

Lembrando que $g = \det(g_{ij}) = (h_1 h_2 h_3)^2$ e que $g_{ii} = (h_i)^2$, temos então que

$$\nabla^2 f = \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q^j} \right) \quad (\text{B.14})$$

é a forma geral do Laplaciano em termos do tensor métrico g_{ij} do sistema de coordenadas arbitrário. Tal resultado será requerido no início do Capítulo 4.

- **Rotacional**

Seja $\mathbf{F} = F_1 \hat{x}_1 + F_2 \hat{x}_2 + F_3 \hat{x}_3$, tal que desejemos calcular $\nabla \times \mathbf{F}$. Usando as seguintes identidades $\nabla \times (\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \mathbf{B}$,

$$\nabla \times (F_1 \hat{x}_1 + F_2 \hat{x}_2 + F_3 \hat{x}_3) = \nabla \times (F_1 \hat{x}_1) + \nabla \times (F_2 \hat{x}_2) + \nabla \times (F_3 \hat{x}_3). \quad (\text{B.15})$$

Para a primeira parcela,

$$\nabla \times (F_1 \hat{x}_1) = \nabla \times (h_1 F_1 \nabla x^1) = h_1 F_1 (\nabla \times \nabla x^1) + \nabla(h_1 F_1) \times \nabla x^1, \quad (\text{B.16})$$

$$= \left[\frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial x^1} (h_1 F_1) \hat{x}_1 + \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial x^2} (h_2 F_2) \hat{x}_2 + \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial x^3} (h_3 F_3) \hat{x}_3 \right] \times \frac{1}{h_1} \hat{x}_1, \quad (\text{B.17})$$

$$\nabla \times (F_1 \hat{x}_1) = \frac{1}{h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial x^3} (h_1 F_1) \hat{x}_2 - \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial x^2} (h_1 F_1) \hat{x}_3. \quad (\text{B.18})$$

De forma análoga,

$$\nabla \times (F_2 \hat{x}_2) = \frac{1}{h_1 h_2} \frac{\partial}{\partial x^1} (h_2 F_2) \hat{x}_3 - \frac{1}{h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x^3} (h_2 F_2) \hat{x}_1 \quad (\text{B.19})$$

e

$$\nabla \times (F_3 \hat{x}_3) = \frac{1}{h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial x^2} (h_3 F_3) \hat{x}_1 - \frac{1}{h_1 h_3} \frac{\partial}{\partial x^1} (h_3 F_3) \hat{x}_2. \quad (\text{B.20})$$

Assim, substituindo os três últimos resultados em (B.15), determinamos completamente $\nabla \times \mathbf{F}$.

Referências Bibliográficas

- [1] LIFE OF SIR ISAAC NEWTON. **The Newton Project**, 2009. Disponível em: < <http://www.newtonproject.ox.ac.uk/view/texts/normalized/OTHE00089> >. Acesso em: 23 maio 2021.
- [2] NOVOSELOV, K. S. et. al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. **Science**, [S.l.], v. 306, p. 666-669, oct. 2004.
- [3] GEIM, A. K; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. **Nature Materials**, [S.l.], v. 6, n. 3 p. 183-191, mar. 2007.
- [4] PARK, C. S; YOON, H; KWON, O. S. Graphene-based nanoelectronic biosensors. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, [S.l.], v. 38, p. 13-22, jun. 2016.
- [5] LIU, J; CUI, L; LOSIC. D. Graphene and graphene oxide as new nanocarriers for drug delivery applications. **Acta Biomaterialia**, [S.l.], v. 9, n. 12, p. 9243-9257, dec. 2013.
- [6] BACHTOLD, A. et al. Aharonov-Bohm oscillations in carbon nanotubes. **Nature**, [S.l.], v. 397, p. 673-675, feb. 1999.
- [7] MAILLY, D. et al. Experimental Observation of Persistent Currents in a GaAs-AlGaAs Single Loop. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 70, n. 3, p. 2020-2023, mar. 1993.
- [8] TAN, W. C; INKSON, J. C. Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model. **Semiconductor Science and Tecnology**, [S.l.], v. 11, n. 11, p. 1635-1641, nov. 1996.
- [9] TAN, W. C; INKSON, J. C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. **Physical Review B**, [S.l.], v. 60, n. 8, p. 5626(1)-5635(10), aug. 1999.

- [10] PEREIRA, L. F. C. et al. Study of electronic properties, magnetization and persistent currents in a mesoscopic ring by controlled curvature. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, [S.l.], v. 132, n. 1386-9477, p. 114760, aug. 2021.
- [11] ZUTIC, I. et al. Spintronics: Fundamentals and applications. **Rev. Mod. Phys**, [S.l.], v. 76, n. 2, p. 323-410, apr. 2004.
- [12] SZOPA, M; ZIPPER, E. Flux qubits on semiconducting quantum ring. **Journal of Physics: Conference Series**, [S.l.], v. 213, p. 012006, mar. 2010.
- [13] SANTINO, R. Entenda o que são computadores quânticos e como eles funcionam. **Olhar Digital**, 24 set. 2019. Disponível em: <<https://olhardigital.com.br/2019/09/24/noticias/entenda-o-que-sao-computadores-quanticos-e-como-eles-funcionam/>>. Acesso em: 23 jul. 2021.
- [14] FUHRER A. et al. Energy Spectra of Quantum Rings. **Nature**, [S.l.], v. 413, n. 6858, p. 822-825, oct. 2001.
- [15] JENSEN, H; KOPPE, H. Quantum mechanics with constraints. **Annals of Physics**, [S.l.], v. 63, n. 2, p. 586-591, abr. 1971.
- [16] DA COSTA, R. C. T; Quantum mechanics of a constrained particle. **Physical Review A**, [S.l.], v. 23, n. 4, p. 1982-1987, abr. 1981.
- [17] FERRARI, G; CUOGHI, G. Schrödinger Equation for a Particle on a Curved Surface in an Electric and Magnetic Field. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 100, n. 23, p. 230403(4), jun. 2008.
- [18] DANTAS, L; FURTADO, C; NETTO, A. L. S. Quantum ring in a rotating frame in the presence of a topological defect. **Physics Letters A**, [S.l.], v. 379, n. 1-2, p. 11-15, jan. 2015.
- [19] RIBEIRO JR, M. C. R. et al. Quantum particle motion on the surface of a helicoid in the presence of harmonic oscillator. **Annals of Physics**, [S.l.], v. 63, n. 2, p. 586-591, apr. 1971.
- [20] KATANAEV, M. O; VOLOVICH, I. V. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. **Annals of Physics**, [S.l.], v. 216, n. 1, p. 1-28, may. 1992.

- [21] GRUNDMANN, M. **The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Nanophysics and Applications**. 3. ed. [S.l.]: Springer, 2016.
- [22] KITTEL, Charles. **Introdução à Física do Estado Sólido**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.
- [23] ALGARNI, H. et. al. Crystal structure and electronic properties of wurtzite $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$: Ab initio study. **Results in Physics**, [S.l.], v. 15, p. 102694, dec. 2019.
- [24] ALFEROV, Z. I. The history and future of semiconductor heterostructures. **Semiconductores**, [S.l.], v. 32, n. 1, p. 1-14, jan. 1998.
- [25] GÜNTHER, B; GUNTHER, S. Molecular beam epitaxy? aspects and applications. **Vacuum**, [S.l.], v. 43, n. 5, p. 357-365, jul. 1992.
- [26] AFKEN, George; WEBER, Hans. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. 7. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2017.
- [27] CALLEN, Herbert. **Thermodynamics and and an Introduction to Thermostatistics**. 2. ed. New York: Wiley, 1985.
- [28] BÜTTIKER, M. et. al. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. **Physical Letters A**, [S.l.], v. 96, n. 7, p. 365-367, jul. 1983.
- [29] LANDAUER, R; BÜTTIKER, M. Resistance of Small Metallic Loops. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 54, n. 18, p. 2049-2052, may. 1985.
- [30] LÉVY L. P. et. al. Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 64, n. 17, p. 2074-2077, apr. 1990.
- [31] CHANDRASEKHAR, V. et. al. Magnetic response of a single, isolated gold loop. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 67, n. 25, p. 3578-3581, dec. 1991.
- [32] CHEUNG, H-F. et. al. Persistent currents in small one-dimensional metal rings. **Physical Review B**, [S.l.], v. 37, n. 11, p. 6050-6062, apr. 1988.
- [33] MAHAN, Gerald D. **Crystal**. abr. 2020. Disponível em: <
<https://www.britannica.com/science/crystal> >. Acesso em: 26 abr. 2020.

- [34] PUTINGAM, R. A; SOLENG H. H. Volterra distortions, spinning strings and cosmic defects. **Classical and Quantum Gravity**, U.K., v. 14, n. 5, p. 1129-1149, may. 1997.
- [35] DIETZ, B. et. al. Fullerene C₆₀ Simulated with a Superconducting Microwave Resonator and Test of the Atiyah-Singer Index Theorem. **Physical Review Letters**, [S.l.], v. 115, n. 2, p. 026801(5), jul. 2015.
- [36] AN, B. et. al. Single pentagon in a hexagonal carbon lattice revealed by scanning tunneling microscopy. **Applied Physics Letters**, [S.l.], v. 78, n. 23, p. 3696-3698, jun. 2001.
- [37] FILGUEIRAS, C; MORAES F. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. **Annals of Physics**, [S.l.], v. 323, n. 12, p. 3150-3157, dec. 2008.
- [38] AMARAL, Luís F. C. **Análise Vetorial**. São Luís: EDUFMA, 2014.
- [39] STRUIK, Dirk J. **Lectures on classical differential geometry**. 2. ed. New York: Dover, 1988.
- [40] CARVALHO, A. M; SÁTIRO, C; MORAES F. Aharonov-Bohm?like effect for light propagating in nematics with disclinations. **Europhysics Letters**, [S.l.], v.80, n. 4, p. 46002, oct. 2007.
- [41] SAKURAI, J. J; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.
- [42] YUKAWA, R. et. al. Anisotropic effective mass approximation model to calculate multiple subband structures at wide-gap semiconductor surfaces: Application to accumulation layers of SrTiO₃ and ZnO. **Surface Science**, [S.l.], v. 641, p. 224-230, nov. 2015.
- [43] CUNHA, MÁRCIO M. et. al. Dirac oscillator in a spinning cosmic string spacetime in external magnetic fields: Investigation of the energy spectrum and the connection with condensed matter physics. **Physical Review D**, [S.l.], v. 102, n. 10, p. 105020-105032, nov. 2020.
- [44] ANDRADE, F. M; SILVA, E. O. Effects of spin on the dynamics of the 2D Dirac oscillator in the magnetic cosmic string background. **The European Physical Journal C**, [S.l.], v. 74, n. 12, p. 3187, dec. 2014.