



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

LUCAS NASCIMENTO MONTEIRO

FÉRMIONS RELATIVÍSTICOS SEM MASSA CONFINADOS À FITA DE MÖBIUS

FORTALEZA

2022

LUCAS NASCIMENTO MONTEIRO

FÉRMIONS RELATIVÍSTICOS SEM MASSA CONFINADOS À FITA DE MÖBIUS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida

Coorientador: Prof. Dr. José Euclides Gomes da Silva

FORTALEZA

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M778f Monteiro, Lucas Nascimento.

Férmions Relativísticos Sem Massa Confinados à Fita de Möbius / Lucas Nascimento Monteiro. – 2022.
69 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2022.

Orientação: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida.

Coorientação: Prof. Dr. José Euclides Gomes da Silva.

1. Confinamento. 2. Mecânica quântica em superfícies. 3. Grafeno. 4. Espinores. 5. Aproximação WKB. I. Título.

CDD 530

LUCAS NASCIMENTO MONTEIRO

FÉRMIONS RELATIVÍSTICOS SEM MASSA CONFINADOS À FITA DE MÖBIUS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: 16 de Fevereiro de 2021

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de
Almeida (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. José Euclides Gomes da
Silva (Coorientador)
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

Prof. Dr. Hans Jürgen Herrmann
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

AGRADECIMENTOS

Agradeço e dedico esta Dissertação a Deus e à Virgem Maria, por guiar meus passos e decisões, fazendo com que meus objetivos fossem alcançados durante todos os meus anos de estudos.

À minha família: meus Pais, Lusanira Nascimento e Nonato Monteiro; meus irmãos, Luis Gabriel, Samuel Nicolas e em memória de meu irmão Rafael; pelo apoio constante durante toda a vida, por nunca terem medido esforços para me proporcionar um ensino de qualidade durante todo o meu período escolar.

À minha namorada, Vanessa Elaine, cuja presença foi essencial para o andamento deste trabalho. Obrigado por estar em todos os momentos e, principalmente, pelo incentivo e apoio essencial nos momentos mais difíceis.

Ao meu orientador Carlos Alberto e Coorientador José Euclides, por todos os conselhos, pela ajuda e pela paciência com a qual guiaram em meu aprendizado.

Ao meu irmão da vida acadêmica João Jardel, por dividir, desde a graduação, as preocupações da vida acadêmica.

Aos professores Aristeu e Hans, por estarem presentes na banca de minha defesa e pelas valorosas contribuições ao trabalho.

Aos professores do Departamento de Física da UFC, em especial aqueles que me lecionaram durante o Mestrado, e aos demais funcionários da instituição.

Aos meus colegas de curso da UVA, em especial Romulo, Gabriel, Walter e Manoel, com quem convivi intensamente durante quatro anos, pelo companheirismo e pela troca de experiências que me permitiram crescer como pessoa.

Aos meus colegas do Programa de Pós Graduação em Física da UFC, pela troca de experiências mediante o convívio virtual causado pela pandemia.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, e do Governo do Estado do Ceará por meio da Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico (FUNCAP). Diante disso, deixo aqui, por fim, meus agradecimentos ao apoio financeiro fornecido.

RESUMO

Neste trabalho, investigamos os efeitos teóricos da curvatura da fita de Möbius sobre a dinâmica quântica de férmions relativísticos sem massa confinados a esta superfície a partir da solução da equação de Dirac. Trabalhamos na aproximação de baixas energias, na qual a partícula apresenta uma relação de dispersão linear e obedece à equação de onda relativística. A curvatura induz um potencial efetivo geométrico quando a partícula executa uma volta em torno de um anel na fita. Estudamos como o potencial modifica as autofunções e os níveis de energia, obtidos a partir de uma aproximação WKB, analisando as regiões de poços e barreiras gerados pela curvatura. O espectro de energia é estimado fixando o valor dos parâmetros que descrevem a fita, resultando em um movimento em torno de fios e anéis.

Palavras-chave: confinamento; mecânica quântica em superfícies; grafeno; espinores; aproximação WKB.

ABSTRACT

In this paper, we investigate the theoretical effects of the curvature of the Möbius strip on the quantum dynamics of massless relativistic fermions confined to this surface, starting from the solution of the Dirac equation. We work on the approximation that at low energies the particle exhibits a linear dispersion relation and obeys the relativistic wave equation. The curvature induces a geometric effective potential when the particle performs a loop around the strip. We study how the potential modifies the eigenfunctions and energy levels, obtained through a WKB approximation, by analyzing the regions of wells and barriers generated by the curvature. The energy spectrum is estimated by fixing the value of the parameters describing the ribbon, resulting in a movement along wires and rings.

Keywords: confinement; quantum mechanics in surfaces; graphene; spinors; WKB approximation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estrutura de rede do grafeno.	11
Figura 2 – Zona de Brillouin do Grafeno, com destaque nos pontos de Dirac.	30
Figura 3 – Dispersão de energia no grafeno.	32
Figura 4 – Construção de uma fita de Möbius.	39
Figura 5 – A fita de Möbius.	40
Figura 6 – Coordenadas e vetores base na fita de Möbius.	41
Figura 7 – Curvaturas Gaussiana e Média em pontos da Fita de Möbius.	42
Figura 8 – Quadrado da Função de Onda ao longo da Largura para valores de θ_0 fixos.	55
Figura 9 – Parte real e imaginária do potencial efetivo no anel central da fita de Möbius.	59
Figura 10 – Módulo quadrado da função de onda no anel central da fita de Möbius.	61
Figura 11 – Parte real e imaginária do potencial efetivo nas bordas da fita em $u_0 = 1$ para um raio $a = 1$	62
Figura 12 – Parte real e imaginária do potencial efetivo nas bordas da fita em $u_0 = -1$ para um raio $a = 1$	63
Figura 13 – Módulo quadrado da função de onda em $u = 1$ e $u = -1$	64

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores numéricos para os níveis de energia no anel central para diferentes valores de a	60
Tabela 2 – Valores numéricos para os níveis de energia para diferentes valores de u_0 e raio $a = 1$	63

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Objetivos	13
1.1.1	<i>Objetivo geral</i>	13
1.1.2	<i>Objetivos específicos</i>	13
1.2	Organização do trabalho	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
2.1	Revisão de relatividade especial e convenções	15
2.1.1	<i>O sistema de unidades naturais</i>	19
2.2	Mecânica quântica relativística	20
2.2.1	<i>Os problemas na equação de Klein-Gordon</i>	21
2.3	A equação de Dirac	22
2.3.1	<i>Densidade de probabilidade</i>	24
2.3.2	<i>Soluções de onda plana</i>	25
2.4	Tight-binding em uma monocamada de grafeno	29
2.5	Espinores em espaços-tempos curvos	33
2.5.1	<i>As formas diferenciais e as equações de Cartan</i>	37
2.5.2	<i>Equação de Dirac no espaço-tempo curvo</i>	38
2.6	A fita de Möbius e suas propriedades	39
2.6.1	<i>Coordenadas de superfície e métrica</i>	40
3	METODOLOGIA	43
3.1	Breve revisão dos modelos intrínseco e extrínseco	43
3.2	Acoplamento mínimo com a curvatura	44
3.2.1	<i>Equação de Dirac em 2+1 dimensões para superfícies arbitrárias</i>	44
3.3	Método de aproximação WKB	45
4	RESULTADOS	48
4.1	Espectro de energia ao longo da largura	52
4.2	Espectro de energia ao longo de um anel	54
4.2.1	<i>Espectro de energia e autofunções para o anel central</i>	58
4.2.2	<i>Espectro de energia e autofunções nas bordas da fita</i>	60
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	65

Referências	66
------------------------------	----

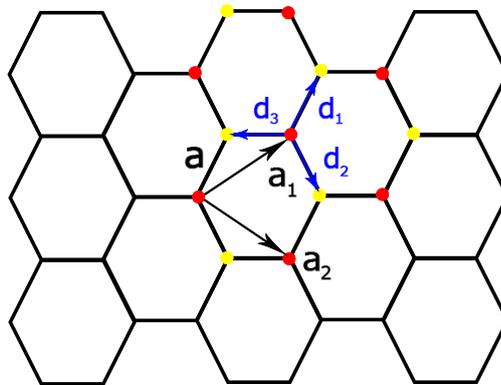
1 INTRODUÇÃO

O grafeno é um material bidimensional estável formado por monocamadas de grafite. Sua descoberta, no ano de 2004 [1], trouxe uma nova perspectiva para a física da matéria condensada, despertando desde então um enorme interesse na comunidade científica. O impacto foi tamanho que levou seus descobridores a serem condecorados com o prêmio Nobel de Física de 2010, apenas seis anos depois. Seu enorme potencial para utilização em dispositivos eletrônicos vem garantindo o interesse e financiamento contínuos por anos. Ademais, o estágio atual de avanço das ciências dos materiais permite criar estruturas curvas a partir de alótropos do Carbono de variadas formas e tamanhos, com novas propriedades eletrônicas, magnéticas e mecânicas[2].

A estrutura do grafeno possui forma de hexágono, o mesmo padrão geométrico de favos de mel, como mostra a Figura 1. Este arranjo pode ser decomposto em duas sub-redes triangulares, representadas pelos pontos vermelhos e amarelos.

Pode-se modelar esta estrutura a partir de dois vetores base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , dados por

Figura 1 – Estrutura de rede do grafeno.



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (1.1)$$

enquanto seus vizinhos são dados pelos vetores

$$\mathbf{d}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad \mathbf{d}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \mathbf{d}_3 = a(-1, 0). \quad (1.2)$$

O parâmetro $a \approx 1.42 \text{ \AA}$, chamado de parâmetro de rede, mede a distância entre os átomos de carbono.

Desse modo, por que então estudar férmions relativísticos sem massa? Semenoff[3] mostrou a conexão entre a dinâmica de elétrons em baixa energia no grafeno e férmions de Dirac

em (2+1) dimensões, a partir da descrição fornecida pelo modelo *tight-binding*. O hamiltoniano obtido tem a forma

$$H_0 = -iv_f(\sigma_1\partial_x + \sigma_2\partial_y), \quad (1.3)$$

onde σ_i representa as Matrizes de Pauli na *i-ésima* direção e v_f a velocidade de Fermi. Esse hamiltoniano leva a equação de Dirac bidimensional, sendo assim formalmente equivalentes no limite quirral, ou seja, quando não há massa. Assim, elétrons no grafeno, quando em baixas energias, apresentam uma relação de dispersão de energia aproximadamente linear em p , isto é, proporcional ao momento. Isso faz do grafeno um dos materiais mais interessantes para pesquisa, uma vez que algumas de suas características vêm dessa descrição, como o paradoxo de Klein [4] que ocorre devido ao fato dos elétrons apresentarem um espectro com energias positivas e negativas.

Estudos mostram ainda uma associação que pode ser feita na interpretação do spin na equação de Dirac e a distribuição dos elétrons em subredes na estrutura do Grafeno, como mostrado na Ref. [5], no qual *spin up* e *spin down* referem-se à probabilidade do elétron se encontrar em uma subrede ou na outra, por consequência recebendo o nome de *Pseudospin*. Uma revisão sobre as propriedades eletrônicas do grafeno e a dinâmica de elétrons a partir do modelo citado foi realizada por Castro Neto *et al.* [6].

Nesse contexto, devido ao grande potencial de aplicações, foram publicados muitos estudos da dinâmica quântica de partículas restritas à superfícies. Da Costa [7] investigou a dinâmica quântica de uma partícula restrita a uma superfície bidimensional imersa em um espaço tridimensional, usando a equação de Schrödinger, por meio de um potencial geométrico responsável por restringir o movimento da partícula a essa superfície. Ele mostrou que a partícula obtém informação de suas vizinhanças, isto é, a terceira dimensão, ao demonstrar que o potencial induzido pela curvatura depende das curvaturas gaussianas e média da superfície. É também possível acoplar intrinsecamente férmions à curvatura através de um acoplamento mínimo na equação de Dirac[8].

Dessa forma, surgiu o interesse em investigar partículas de Dirac na fita de Möbius. Mas, por que estudar essa superfície? É possível, de fato, moldar faixas de carbono para terem este formato. Investigações teóricas mostram serem estáveis e apresentam suas propriedades eletrônicas [9, 10]. Estudos mostram ainda que a construção de uma faixa de grafeno neste formato aumenta a eficiência da transferência de cargas, condutividade e outras propriedades [11], além da existência de um efeito spin-Hall [12, 13].

Diante disto, Li e Ram-Mohan[14] propõem uma descrição da dinâmica quântica de uma partícula restrita à superfície de Möbius, a partir da solução da equação de Schrödinger. Eles investigaram os níveis de energia, o momento angular e o efeito da curvatura sobre a dinâmica da partícula.

No contexto de férmions relativísticos, Flouris *et al.* [15] investigaram propriedades topológicas e geométricas de transporte de uma fita de grafeno em formato de Möbius e, para o caso não massivo, Souza e Furtado[16] estudaram o problema do confinamento a partir da equação de Dirac, adaptando as condições de contorno para a superfície de Möbius.

1.1 Objetivos

1.1.1 *Objetivo geral*

Ainda são desconhecidos os efeitos da curvatura de para um modelo de férmions relativísticos sem massa em (2+1) dimensões, sendo a investigação deste tópico o principal objetivo desse trabalho.

1.1.2 *Objetivos específicos*

Com isso, definem-se os objetivos específicos como:

- Obter, a partir da equação de Dirac, equações diferenciais para cada componente do espinor que descrevem a dinâmica de férmions confinados à superfície de Möbius.
- Encontrar, a partir de uma transformação, uma equação auxiliar tipo Schrödinger, de modo a identificar o potencial efetivo induzido pela curvatura.
- Obter o espectro de energia, a função de onda e seu módulo quadrado em pontos da fita.
- Investigar como o potencial modifica a dinâmica da partícula, comparando as barreiras e poços com o quadrado da função de onda em algumas regiões da fita.
- Por fim, comparar as propriedades eletrônicas com aquelas encontradas em outras superfícies.

1.2 Organização do trabalho

Finalmente, a organização do trabalho se deu da seguinte forma: O capítulo 2, intitulado “Fundamentação Teórica” busca revisar os principais conceitos de relatividade restrita

e mecânica quântica relativística necessários, discutindo ainda sobre o modelo Tight-Binding para uma monocamada de grafeno e o acoplamento de espinores em espaços curvos, bem como a fita de Möbius e suas propriedades.

O capítulo 3, “Metodologia”, apresenta uma revisão sobre os principais modelos de acoplamentos de partículas à curvatura. São discutidos os modelos extrínseco, intrínseco e suas diferenças metodológicas. Por fim, é obtida a equação de Dirac em 2+1 dimensões para superfícies gerais.

No capítulo 4, “Resultados”, são apresentados os principais resultados obtidos a partir da aplicação do modelo intrínseco para a superfície da fita de Möbius. Foram obtidas equações diferenciais para a função de onda em cada componente do espinor. Obteve-se o potencial induzido pela curvatura e, empregando uma aproximação do tipo WKB, foram encontradas as soluções aproximadas e estimado o espectro em diferentes pontos da fita.

Finalmente, o capítulo 5 “Conclusões e Perspectivas Futuras” resume o que foi realizado e os principais resultados obtidos, bem como o que pode ser realizado em trabalhos futuros a partir deste.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Revisão de relatividade especial e convenções

Antes de iniciar os conceitos relacionados propriamente de espinores e espaços-tempo curvos, será realizada uma breve discussão de Relatividade Especial e as notações utilizadas daqui em diante.

A relatividade especial, publicada por Albert Einstein (1879-1955) no ano de 1905 [17], é responsável pela unificação do Espaço e do Tempo em uma única entidade, o qual é conhecido como *espaço-tempo*. Ela propõe dois postulados fundamentais, que podem ser expressados como [18]

- **O princípio da relatividade:**

As leis físicas são as mesmas em todos os referenciais inerciais.

- **O princípio da invariância da velocidade da luz:**

A velocidade da luz no vácuo, c , é a mesma em todas as direções e em todos os referenciais inerciais, e é independente do movimento da fonte.

As transformações que mantêm c invariante são conhecidas como *transformações de Lorentz*. Elas relacionam dois referenciais inerciais, o qual pode-se tomar um como em estado de repouso, o qual será chamado de S , e outro, S' , se afastando relativamente ao primeiro com velocidade v na direção x .

A relação diz que as coordenadas em S' , escritas como (t', x', y', z') , em função das coordenadas em S , (t, x, y, z) , são dadas por

$$\begin{cases} t' = \gamma \left(t - \frac{vx}{c^2} \right) \\ x' = \gamma (x - vt) \\ y' = y \\ z' = z \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde γ é chamado *fator de Lorentz*, sendo dado por

$$\gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.2)$$

com $\beta = \frac{v}{c}$.

As teorias, em geral, são escritas em termos de objetos matemáticos chamados de *escalares, vetores e tensores*. Estes serão de suma importância em todo o presente trabalho.

Vetores em um espaço tridimensional podem ser descritos em relação a uma determinada base com 3 componentes. Se essa base for rotacionada, então estas componentes mudam, mas sua distância até a origem não muda.

No *espaço-tempo* há uma classe especial de vetores, chamados *quadrivetores*. Estes se caracterizam por possuir três componentes espaciais e uma componente temporal.

$$\mathbf{x} = (ct, x, y, z) \quad (2.3)$$

A Relatividade Especial acontece em um espaço-tempo chamado *espaço-tempo de Minkowski*, caracterizado por ser um espaço quadridimensional (1 dimensão temporal + 3 dimensões espaciais) plano. É o espaço-tempo mais simples que se pode ter, visto que espaços mais complexos envolvem curvatura e/ou torção. O Espaço de Minkowski possui curvatura *zero*.

Além disso, denotam-se as componentes de vetores tridimensionais com índices do alfabeto romano (i, j, k, \dots), com esses sendo 1, 2 ou 3.

Vetor Tridimensional

$$\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3) \quad \Rightarrow \quad x^i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.4)$$

Para quadrivetores, denota-se a coordenada temporal com índice 0, e utilizam-se letras gregas para representar suas componentes (Por exemplo, $\alpha, \beta, \mu, \dots$) e, dessa forma, estas podem ser 0, 1, 2 ou 3. É dito que a coordenada x^0 é do tipo Tempo e as demais do tipo Espaço.

Quadrivetor no espaço-tempo

$$x = (x^0, x^1, x^2, x^3) \quad \Rightarrow \quad x^\mu \quad (\mu = 0, 1, 2, 3) \quad (2.5)$$

A fim de diferenciar vetores tridimensionais e quadrivetores¹, os primeiros são escritos **em negrito**, de forma que quadrivetores possam ser escritos como

$$x = (ct, \mathbf{x}) \quad (2.6)$$

¹ Note aqui, no entanto, que a principal diferença entre vetores e quadrivetores é que estes vivem em espaços diferentes, visto que o primeiro é definido em um espaço tridimensional, e o posterior se encontra em um espaço-tempo quadridimensional.

Outro conceito importante é o de índices *Contravariante* e *Covariante*. Perceba que os vetores foram escritos com índice em cima. Estes recebem o nome de índices Contravariantes. Para vetores cujas componentes tiverem o índice em baixo, como x_μ , serão chamados Covariantes.

Este é um aspecto que não existe no espaço euclidiano tridimensional. De fato, para este espaço, essa distinção se torna irrelevante.

A diferença entre estas categorias de vetores está na forma que suas componentes se transformam. Uma transformação geral de coordenadas de um referencial inercial para outro mapeia as componentes da seguinte forma $\{x^\mu\} \rightarrow \{\bar{x}^\mu\}$. Um vetor qualquer é dito contravariante quando se transforma como

$$\bar{x}^\mu = \sum_{\nu} \left(\frac{\partial \bar{x}^\mu}{\partial x^\nu} \right) x^\nu = \left(\frac{\partial \bar{x}^\mu}{\partial x^\nu} \right) x^\nu. \quad (2.7)$$

Perceba que o somatório foi omitido. Esta é a *convenção de soma de Einstein*, que implica que o somatório sobre índices repetidos podem ser omitidos. Em outras palavras, em geral, quando houverem índices repetidos, está implícito um somatório.

Para um vetor covariante, tem-se a que o conjunto de componentes se transformam como $\{x_\mu\} \rightarrow \{\bar{x}_\mu\}$ seguindo a relação dada por

$$\bar{x}_\mu = \left(\frac{\partial x^\mu}{\partial \bar{x}^\nu} \right) x_\nu. \quad (2.8)$$

Note que um vetor covariante se transforma na forma inversa de um vetor contravariante.

Voltando às transformadas de Lorentz, sua principal característica é que, mesmo alterando as componentes, mantém inalterado o módulo de um quadrivetor [19]. Este módulo pode ser calculado como

$$|x|^2 = x \cdot x = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2. \quad (2.9)$$

Assim, é possível definir o *produto interno para quadrivetores*. Sejam a e b dois quadrivetores que vivem no Espaço de Minkowski, com as componentes $x = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (x^0, \mathbf{x})$ e $y = (y^0, y^1, y^2, y^3) = (y^0, \mathbf{y})$. Então, o produto interno entre eles é dado por

$$\begin{aligned} x \cdot y &= x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 \\ &= x^0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

É possível escrever esse produto como

$$x \cdot y = \eta_{\mu\nu} x^\mu y^\nu, \quad (2.11)$$

onde $\eta_{\mu\nu}$ é uma matriz dada por

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \eta_{00} & \eta_{01} & \eta_{02} & \eta_{03} \\ \eta_{10} & \eta_{11} & \eta_{12} & \eta_{13} \\ \eta_{20} & \eta_{21} & \eta_{22} & \eta_{23} \\ \eta_{30} & \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Essa matriz é, na verdade, um *tensor*, chamado de *tensor métrico* ou simplesmente *métrica*. Ela é responsável por caracterizar um espaço-tempo, pois a partir dela é possível medir distâncias entre pontos do espaço-tempo. Para uma distância infinitesimal em um espaço-tempo qualquer caracterizado por uma métrica $g_{\mu\nu}$, vale a relação

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu. \quad (2.13)$$

Denota-se por $\eta_{\mu\nu}$ a métrica para o espaço-tempo de Minkowski.

Outro aspecto importante da métrica é que ela relaciona vetores com índices contra-variantes e vetores com índices covariantes, pela seguinte relação,

$$x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu. \quad (2.14)$$

Assim, é possível “subir” ou “descer” índices com o auxílio da métrica. A partir da forma matricial (2.12) é fácil ver que, para espaço-tempo de Minkowski, a relação é dada por

$$\begin{cases} x^0 = x_0 \\ x^i = -x_i \end{cases}. \quad (2.15)$$

Dessa forma, é fácil ver que o produto escalar entre x e y pode ser escrito ainda nas formas

$$\begin{aligned} x \cdot y &= \eta_{\mu\nu} x^\mu y^\nu = \eta^{\mu\nu} x_\mu y_\nu \\ &= x_\mu y^\mu = x^\mu y_\mu. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Além do quadri vetor posição, outra definição importante é o quadri vetor momento, escrito como

$$p = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right), \quad (2.17)$$

onde E é a energia e p_i é a componente do momento na direção i .

O produto interno $p \cdot p$ é então dado por

$$p \cdot p = p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2, \quad (2.18)$$

onde m é a massa de repouso da partícula. Note que a relação de energia encontrada é para uma partícula livre relativística, geralmente escrita na forma

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (2.19)$$

Define-se também o quadri vetor ∂_μ , composto pelas componentes

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.20)$$

O operador D'Alembertiano é definido como

$$\begin{aligned} \partial_\mu \partial^\mu &\equiv \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

2.1.1 O sistema de unidades naturais

A partir de agora, em nossas contas, faremos $c = \hbar = 1$. Este processo pode parecer estranho a princípio, mas, na prática, o que é feito é somente escolher um sistema de unidades no qual se quer trabalhar. Este é conhecido como *Sistema de Unidades Natural*.

É comum, na relatividade, a partir da famosa equação de Einstein

$$E = mc^2, \quad (2.22)$$

medir a massa em função da energia da partícula. Convenientemente, escolhe-se trabalhar com unidades de Energia como eV (Elétron-Volt) e MeV (Mega Elétron-Volt). Dessa forma, pode-se dizer que a massa do elétron é $0.511 MeV/c^2$, ou simplesmente $0.511 MeV$.

Analogamente, quando se faz $\hbar = 1$, podemos expressar unidades de comprimento em função da energia. O mesmo procedimento é frequentemente feito na Gravitação, quando se toma a constante da Gravitação Universal de *Isaac Newton (1643 – 1727)* como $G = 1$, e na Mecânica Estatística quando se toma a constante de *Ludwig Boltzmann (1844 – 1906)* como $k_B = 1$.

É sempre possível voltar ao sistema de unidades inicial colocando as constantes “de volta ao lugar”.

2.2 Mecânica quântica relativística

Tentativas de incorporar elementos da Relatividade na Mecânica Quântica remontam desde a época surgimento de ambas teorias. A procura de uma Equação de Onda Relativística se iniciou quando *Erwin Schrödinger* (1887 – 1961), em sua busca por uma equação descrevendo as ondas de De Broglie, encontrou a expressão que é hoje conhecida como *Equação de Klein-Gordon*. Esta foi encontrada em seus cadernos do final de 1925, onde, aparentemente, fez uma tentativa de aplicá-la ao átomo de hidrogênio.

No entanto, por não considerar o spin do elétron, a equação prediz a estrutura fina do átomo de hidrogênio incorretamente. Schrödinger então elaborou uma segunda tentativa do problema e produziu o que é conhecido hoje como a *Equação de Schrödinger*, que funciona brilhantemente, mas não é relativística. Esta nos diz como um *estado quântico* $|\psi(\mathbf{x}, t)\rangle$ evolui no tempo, e pode ser escrita [20] como

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.23)$$

onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano e $\psi(\mathbf{x}, t)$ é a Função de Onda. Desta forma, o Hamiltoniano pode ser interpretado como o gerador das translações no tempo, e seus autovalores como as *energias permitidas do sistema*² [21].

Para uma partícula não relativística submetida a um potencial $V(\hat{\mathbf{x}})$, na grande maioria dos casos, é possível escrever o Hamiltoniano na forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.24)$$

sendo $\hat{\mathbf{p}}$ o operador momento linear em 3 dimensões.

Assim, a relação de dispersão para a partícula livre neste caso pode ser escrita como

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (2.25)$$

com \mathbf{p} sendo o autovalor do operador momento linear.

No entanto, para uma partícula relativística, essa relação se torna

$$E^2 = p^2 + m^2, \quad (2.26)$$

com $p^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$.

² Um sistema quântico pode apenas assumir certos valores discretos de energia, chamadas energias permitidas ou níveis de energia.

Para criar uma equação de onda relativística devemos tratar as grandezas E e \mathbf{p} como operadores da mecânica quântica, utilizando o sistema de unidades natural, que, devido à ligação desses observáveis com os geradores de translação [21], podem ser dados por

$$E \Rightarrow \hat{H}\varphi = i\frac{\partial\varphi}{\partial t} \quad (2.27)$$

$$\mathbf{p} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}}\varphi = -i\nabla\varphi, \quad (2.28)$$

onde os operadores agem em uma função $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$. Substituindo em (2.26) os operadores e aplicando à função de onda pelo lado esquerdo em ambos lados da igualdade, obtêm-se

$$-\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}(\mathbf{x}, t) = \left(-\nabla^2 + m^2\right)\varphi(\mathbf{x}, t), \quad (2.29)$$

o qual, por fim, pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right)\varphi(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ (\square + m^2)\varphi(\mathbf{x}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Essa equação, vastamente conhecida na literatura, é conhecida como *equação de Klein-Gordon*. Ela é a primeira equação de onda relativística, no entanto apresenta alguns problemas quando interpretada como uma função de onda.

2.2.1 Os problemas na equação de Klein-Gordon

Uma das razões pelas quais a equação de Klein-Gordon foi inicialmente descartada foi algo bastante desagradável que ocorre quando se calcula o fluxo da densidade de probabilidade.

A equação de continuidade do eletromagnetismo, escrita na notação de quadrivetores, onde j^μ é o quadrivetor corrente definido por $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$, é dada por

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (2.31)$$

De forma análoga ao caso clássico (não relativístico), toma-se a parte espacial do quadrivetor corrente como:

$$\mathbf{j} = -i(\varphi^*\nabla\varphi - \varphi\nabla\varphi^*). \quad (2.32)$$

Assim, a densidade de probabilidade é definida como

$$\rho = i\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\varphi\right). \quad (2.33)$$

Se tomarmos, por exemplo, uma função de onda da forma $\phi(x) = Ae^{-ipx}$, teremos a densidade de probabilidade dada por

$$j^0 = \rho = 2|A|^2 E. \quad (2.34)$$

No entanto, E não é positivamente definido. De fato,

$$E^2 = p^2 + m^2 \Rightarrow E = \pm(p^2 + m^2). \quad (2.35)$$

Como E pode ser positivo ou negativo, não podemos interpretar ρ como uma densidade de probabilidade, pois *não existe probabilidade negativa!* Isso nos mostra que não é possível interpretar a equação de Klein-Gordon como uma equação da mecânica quântica de uma única partícula.

2.3 A equação de Dirac

De modo a solucionar os problemas com a Equação de Klein-Gordon que se discutiu, *Paul Dirac (1902-1984)* propõe algumas mudanças. Ele percebe que a raiz desses problemas reside no fato de que a equação de Klein-Gordon contém uma derivada de tempo de segunda ordem como parte do operador D'Alembertiano $\partial_\mu \partial^\mu = \square$. Dirac então percebeu que há uma maneira de construir uma equação de movimento que é de primeira ordem na derivada do tempo.

Voltando o olhar para o operador $(\square + m^2)$ que age na função de onda φ na equação de Klein-Gordon, não se pode simplesmente tirar sua raiz ou quebrá-lo em uma multiplicação do tipo $(\square + m^2) = (\sqrt{\square} + im)(\sqrt{\square} - im)$, pois $\sqrt{\square}$ não é definido.

Dirac viu que uma possível solução era definir um quadrivetor γ^μ com as seguintes propriedades:

$$(\gamma^0)^2 = 1 \quad (\gamma^i)^2 = -1. \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.36)$$

No entanto, as componentes do quadrivetor não são números. Elas anticomutam entre si! São matrizes, que recebem o nome de Matrizes Gama, e obedecem à seguinte relação de anticomutação:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad (2.37)$$

onde $\{A, B\}$ é chamado Anticomutador, e é definido como

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (2.38)$$

O que faremos então é acoplar γ^μ com as derivadas, definindo o operador

$$\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu. \quad (2.39)$$

Assim, podemos escrever

$$\not{\partial}^2 = (\gamma^\mu \partial_\mu)^2 = \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial y} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial z} \right)^2. \quad (2.40)$$

Fazendo a expansão deste termo e usando as relações de anticomutação, percebemos que só restam as multiplicações que envolvem os mesmos índices, no restando

$$\not{\partial}^2 = (\partial_0)^2 - (\partial_1)^2 - (\partial_2)^2 - (\partial_3)^2 = \square. \quad (2.41)$$

Assim,

$$\begin{aligned} (\square + m^2) &= (\not{\partial}^2 + m^2) \\ &= (\not{\partial} - im)(\not{\partial} + im) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Aplicando o operador à função de onda $\psi(x)$, encontra-se

$$(\not{\partial} + im)\psi(x) = 0 \quad (2.43)$$

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0. \quad (2.44)$$

Esta é a famosa *equação de Dirac*. Ela desempenha um papel fundamental na mecânica quântica relativística e na teoria quântica de campos, pois é capaz de descrever partículas de spin 1/2 como elétrons, neutrinos, múons, etc.

No entanto, o que são essas matrizes componentes do quadrivetor γ^μ ? Não há uma forma única de expressar essas matrizes. Temos a liberdade da escolha de sua representação (desde que obedeça à relação de anticomutação!). Um exemplo de conjunto de Matrizes que satisfazem essas relações é

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Essa representação das Matrizes Gama é chamada *Representação Quiral*. Há várias outras formas de representação, que podem ser convenientemente usadas em aplicações específicas. É possível ainda simplificar a notação dessas matrizes, escrevendo simplesmente

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ -\sigma_3 & 0 \end{pmatrix},$$

onde $\mathbb{1}$ é a Matriz Identidade e σ_i são as Matrizes de Pauli, definidas como

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

2.3.1 Densidade de probabilidade

Se separarmos as derivadas espaciais da temporal, podemos chegar a uma equação análoga à Equação de Schrödinger, do tipo:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi = (-i \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m) \psi, \quad (2.48)$$

onde definiu-se

$$\beta = \gamma^0 \quad \alpha^i = \gamma^0 \gamma^i. \quad (2.49)$$

Ambas as matrizes são hermitianas, pois:

$$\beta = \beta^\dagger \quad \alpha = \alpha^\dagger \quad (2.50)$$

Agora, se tomarmos o conjugado hermitiano da Equação de Dirac e as combinarmos convenientemente, obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + \nabla \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) = 0 \quad (2.51)$$

Se definirmos o quadrivetor j^μ como $j^\mu = (\rho, \mathbf{j}) = (\psi^\dagger \psi, \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi)$, obtemos a equação de continuidade para a densidade de probabilidade,

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (2.52)$$

com densidade de probabilidade definida por:

$$\rho = \psi^\dagger \psi. \quad (2.53)$$

Assim, a probabilidade total é dada por:

$$P = \int d^3x \psi^\dagger \psi. \quad (2.54)$$

Nota-se que a Equação de Dirac elimina com sucesso o problema de probabilidade negativa. No entanto, ainda resta o problema dos Estados de Energia Negativa.

Posteriormente, Dirac e outros perceberam que estados de energia negativos implícitos na equação de Dirac poderiam ser removidos assumindo a existência de partículas com a mesma massa que os elétrons, mas com carga elétrica oposta. Isso não apenas garantiu a estabilidade dos átomos, mas também foi a primeira proposta da existência de partículas de *antimatéria*. A princípio, não era tão clara a interpretação dessas novas partículas. De fato, inicialmente nem se pensavam que fossem partículas. Dirac desenvolveu uma teoria que ficou conhecida como a Teoria dos “*Buracos de Dirac*” para explicar este fenômeno. Posteriormente, a *Teoria Quântica de Campos* incorporou naturalmente antipartículas em seu formalismo.

A evidência para os *pósitrons* (antipartícula do elétron) foi descoberta em 1932 em raios cósmicos. Processos como produção de pares e aniquilação entre partícula e antipartícula foram descobertos. Isso mostrou que não é necessário manter fixo o número de partículas durante uma interação, como é feito na abordagem da Mecânica Quântica Relativística.

Por fim, apesar da equação de Dirac ter sido bem sucedida em alguns casos na sua interpretação de uma partícula, como no cálculo do espectro relativista do átomo de hidrogênio e no acoplamento spin-órbita para o elétron [22], a interpretação com uma única partícula não é possível, uma vez que descreve tanto partículas como antipartículas. Assim, é necessário elucidar que, apesar de ser uma função de onda, ψ tem propriedades muito diferentes. Para ilustrar melhor essas características, encontramos as soluções de onda plana para a equação de Dirac.

2.3.2 Soluções de onda plana

Note que o fato das Matrizes Gama γ^μ serem matrizes 4x4 implica que as funções de onda são, neste caso, matrizes colunas de 4 componentes. Do estudo da *Teoria do Momento Angular*, é conhecido que funções de ondas com várias componentes sugerem um Momento

Angular Spin não trivial. Assim, as soluções da Equação de Dirac descrevem partículas com *spin* [23].

Para investigar este fato, podemos aprofundar no entendimento desta equação encontrando sua solução mais simples: *Partículas Livres*.

Para isso definiremos a função de onda no espaço dos momentos $\Psi(p)$, a partir de uma *Transformação de Fourier* do tipo

$$\psi(x) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \Psi(p) e^{-ip_\mu x^\mu}, \quad (2.55)$$

As componentes da função de onda $\psi(x)$, por conveniência, serão escritas como

$$\Psi(p) = \begin{pmatrix} u^1(p) \\ u^2(p) \\ v^1(p) \\ v^2(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

O operador momento é dado por $p_\mu = i\partial_\mu$. Definimos então o operador

$$\not{p} = \gamma^\mu p_\mu, \quad (2.57)$$

de forma que a Equação de Dirac fique dada por $(\not{p} - m)\Psi(p) = 0$.

Para maior simplicidade, consideremos o movimento da partícula sendo ao longo do eixo z , de forma que

$$p^1 = p^2 = 0. \quad (2.58)$$

Assim, podemos expandir o somatório, obtendo

$$(\gamma^0 p_0 + \gamma^3 p_3 - m)\Psi(p) = 0. \quad (2.59)$$

Em seguida, substituímos as Matrizes Gama, levando a

$$\begin{pmatrix} p_0 - m & 0 & p_3 & 0 \\ 0 & p_0 - m & 0 & -p_3 \\ -p_3 & 0 & -(p_0 - m) & 0 \\ 0 & p_3 & 0 & -(p_0 - m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^1(p) \\ u^2(p) \\ v^1(p) \\ v^2(p) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.60)$$

e, portanto,

$$\det \begin{pmatrix} p_0 - m & 0 & p_3 & 0 \\ 0 & p_0 - m & 0 & -p_3 \\ -p_3 & 0 & -(p_0 - m) & 0 \\ 0 & p_3 & 0 & -(p_0 - m) \end{pmatrix} = 0 \quad (2.61)$$

Obtemos então que

$$p_0^2 - p_3^2 - m^2 = 0 \quad (2.62)$$

$$p_0 = \pm E = \pm \sqrt{p_3^2 + m^2}. \quad (2.63)$$

Assim, encontramos que cada valor de energia está duplamente degenerado. Alternativamente, se escrevermos

$$\begin{aligned} \det(\gamma^\mu p_\mu - m) = 0 &\Rightarrow \det \begin{pmatrix} (p_0 - m)\mathbb{1} & \sigma_3 p_3 \\ -\sigma_3 p_3 & -(p_0 - m)\mathbb{1} \end{pmatrix} = 0 \\ &\Rightarrow \det(-(p_0^2 - m^2) + p_3^2) = 0 \\ &\Rightarrow p_0^2 - p_3^2 - m^2 = 0, \end{aligned} \quad (2.64)$$

de forma que encontramos o mesmo resultado. Dessa maneira, podemos resolver a equação (2.60) escrevendo a função de onda na forma

$$\Psi(p) = \begin{pmatrix} u(p) \\ v(p) \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

onde

$$u = \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix} \quad v = \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Para E positivo, denotando por $E_+ = \sqrt{p_3^2 + m^2}$, temos

$$\begin{pmatrix} (E_+ - m)\mathbb{1} & \sigma_3 p_3 \\ -\sigma_3 p_3 & -(E_+ - m)\mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0, \quad (2.67)$$

o que leva a

$$v(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_+ + m} u(p). \quad (2.68)$$

Agora, se escolhermos duas soluções independentes para $u(p)$ na forma

$$u(p) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.69)$$

obteremos, respectivamente

$$v(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_+ + m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{p_3}{E_+ + m} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

$$v(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_+ + m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_3}{E_+ + m} \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

De forma análoga, para o autovalor negativo de energia $E_- = -\sqrt{p_3^2 + m^2}$, obtemos

$$u(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_- - m} v(p). \quad (2.72)$$

Escolhendo $v(p)$ como

$$v(p) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

chegamos em

$$u(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_- - m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{p_3}{E_- - m} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

$$u(p) = -\frac{\sigma_3 p_3}{E_- - m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_3}{E_- - m} \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

Obtivemos portanto as soluções

$$\Psi_+(p) = \begin{pmatrix} u(p) \\ -\frac{\sigma_3 p_3}{E_+ + m} u(p) \end{pmatrix} \quad \Psi_-(p) = \begin{pmatrix} -\frac{\sigma_3 p_3}{E_- - m} v(p) \\ v(p) \end{pmatrix}. \quad (2.76)$$

se escrevemos de forma explicitamente, obtemos as soluções

$$\Psi_+^\uparrow(p) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_3}{E_+ + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_+^\downarrow(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{p_3}{E_+ + m} \end{pmatrix},$$

$$\Psi_-^\uparrow(p) = \begin{pmatrix} -\frac{p_3}{E_- - m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_-^\downarrow(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_3}{E_- - m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.77)$$

A notação é sugestiva que estamos observando uma função de onda para uma partícula de Spin $\frac{1}{2}$. As quatro soluções que encontramos são objetos de 4 componentes que recebem o nome de *Bispinores*. Este, por sua vez, é formado de dois *Espinores* u e v .

Assim como Vetores, Espinores se distinguem pela forma como se transformam. Esses também podem sofrer rotações e transformações de Lorentz, no entanto não possuem o mesmo comportamento.

No caso não relativístico, como constatado pela famosa experiência de *Stern-Gerlach* [24], espera-se que elétrons tenham dois possíveis estados de spin, chamados *spin up* e *spin down*. Por apresentar certas propriedades, os espinores são, portanto, os objetos mais adequados para descrever partículas fermiônicas, conseguindo acomodar os dois estados de Spin do Elétron [25].

No entanto, em sistemas relativísticos, como descrito pela Equação de Dirac, passa-se a ter quatro componentes ao invés de duas. Como já discutido, estas surgem devido à existência das antipartículas.

Por fim, a associação do *spin* no grafeno não é feita de maneira trivial. As partículas em baixas energias não apresentam tais propriedades, visto ser um efeito relativístico. Entretanto, cabe a interpretação citada anteriormente, onde o spin no modelo que descreve o Grafeno está associado às propriedades estruturais deste, referindo-se a possibilidade de se encontrar a partícula em uma das duas subredes que compõe a estrutura.

2.4 Tight-binding em uma monocamada de grafeno

O modelo *Tight-Binding* consiste em uma aproximação utilizada para descrever elétrons, que não interagem entre si, sujeitos à um potencial periódico proveniente de uma rede de íons. Inicialmente, consideramos que cada átomo está muito distante do próximo. Assim, o estado do elétron pode ser descrito através da equação de Schrödinger com o potencial de apenas um dos átomos,

$$H_{at}\phi_n(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V_i(\mathbf{r}) \right) \phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r}). \quad (2.78)$$

A medida que a dimensão de \mathbf{r} se torna da ordem ou maior que o parâmetro da rede, o hamiltoniano do cristal começa a diferir de H_{at} . Assim, são necessárias correções na função de onda devido a interação com os demais átomos, que serão dadas em termos das funções de onda $\phi_n(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, para todos os N sítios \mathbf{R} na rede [26].

No formalismo da segunda quantização, podemos definir um operador $c^\dagger(\mathbf{R})$ que cria um elétron no estado $\phi_n(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Assim, podemos escrever o Hamiltoniano do cristal como

$$H = - \sum_{n, \mathbf{R}, \mathbf{R}'} t_n(\mathbf{R} - \mathbf{R}') c^\dagger(\mathbf{R}) c(\mathbf{R}'), \quad (2.79)$$

sendo $t_n(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ a energia de *hopping* (“salto”) do elétron de um sítio para outro.

A estrutura do Grafeno não pode ser descrita por uma rede de Bravais, haja visto que não é possível definir um conjunto de vetores pelos quais seja possível acessar qualquer ponto da

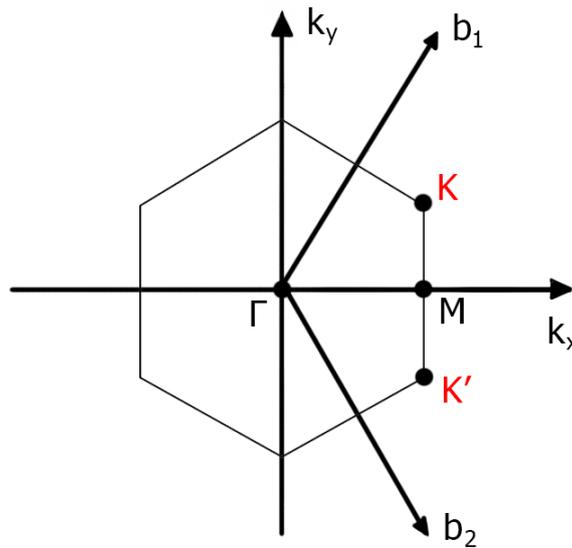
rede. No entanto, é possível considerar uma rede triangular com uma base de dois átomos por célula unitária. Os vetores base são dados por (1.1). Pode-se, assim, escrever os vetores base na rede recíproca como

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}), \quad (2.80)$$

Segundo *Neto et. al* [6], os pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' são de importância particular para a física do grafeno. São localizados nos cantos da primeira *Zona de Brillouin*³ e recebem o nome de *pontos de Dirac*. Sua posições são dadas por

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad (2.81)$$

Figura 2 – Zona de Brillouin do Grafeno, com destaque nos pontos de Dirac.



Se considerarmos que um elétron no grafeno pode “saltar” para os primeiros vizinhos, o Hamiltoniano que o descreve será dado por

$$H_{TB} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i \right), \quad (2.82)$$

onde $i(j)$ denotam pontos na subrede $A(B)$. O parâmetro t ($\approx 2.8 \text{ eV}$) é a energia de *hoping* para os primeiros vizinhos em diferentes subredes. Por fim, operador a_i^\dagger cria um elétron na subrede A na posição \mathbf{r}_i , enquanto a_i o aniquila. De forma similar, b_j^\dagger e b_j desempenha um

³ Zona de Brillouin é definida como a célula primitiva do tipo Wigner-Seitz da rede recíproca.

papel análogo para a subrede B. Os operadores obedecem às relações

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \{b_i, b_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.83)$$

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{b_i, b_j\} = \{b_i^\dagger, b_j^\dagger\} = 0, \quad (2.84)$$

onde δ_{ij} é chamado de Delta de Kronecker, definido como

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}. \quad (2.85)$$

Em uma rede infinita, é possível fazer uma transformada de Fourier do Hamiltoniano, de tal forma que podemos escrever

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} a_k \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} b_{k'}, \quad (2.86)$$

com N denotando o número de células unitárias e $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Substituindo em (2.82), obtemos

$$H_{TB} = -\frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left(e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} a_k^\dagger b_{k'} + \text{h.c.} \right), \quad (2.87)$$

onde *h.c.* indica o conjugado hermitiano do termo anterior.

Cada átomo tem três vizinhos mais próximos, assim, fixamos um ponto em j e variamos i para cada vizinho. Obtemos

$$H_{TB} = -\frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} \left(e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} + \text{h.c.} \right]. \quad (2.88)$$

Por definição, temos que a função Delta de Dirac é dada por

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_j} = \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) = \begin{cases} \infty, & \mathbf{k}' = \mathbf{k} \\ 0, & \mathbf{k}' \neq \mathbf{k} \end{cases}. \quad (2.89)$$

Portanto, temos que

$$\begin{aligned} H_{TB} &= -t \sum_k \left[\left(e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} + \text{h.c.} \right] \\ &= -t \sum_k \left[\left(2e^{-ik_x a/2} \text{Cos}\left(k_y a\sqrt{3}/2\right) + e^{ik_x a} \right) a_k^\dagger b_{k'} + \text{h.c.} \right] \\ &\equiv t \sum_k \left[g(\mathbf{k}) a_k^\dagger b_{\mathbf{k}} + g^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right], \end{aligned} \quad (2.90)$$

onde $g(\mathbf{k})$ é o fator de estrutura da rede, dado por

$$g(\mathbf{k}) \equiv e^{ik_x a} + 2e^{-ik_x a/2} \text{Cos}\left(k_y a \sqrt{3}/2\right). \quad (2.91)$$

Dessa forma, (2.90) pode ser escrito numa forma matricial, dada por

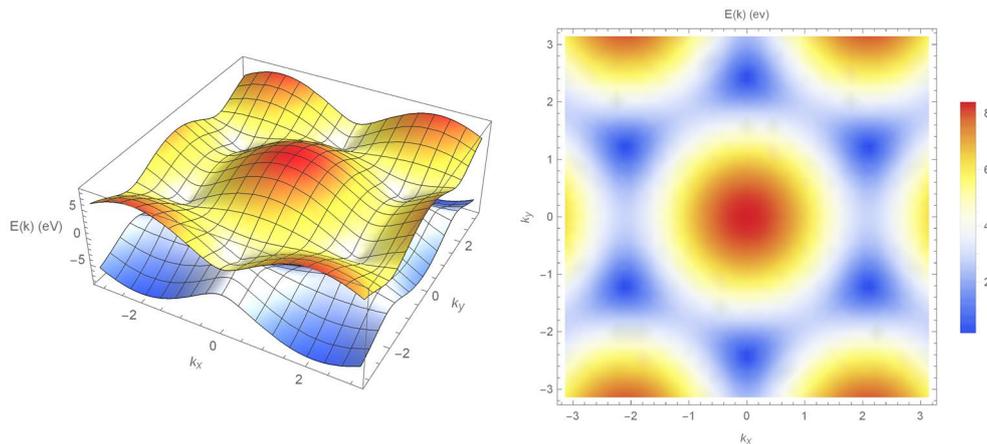
$$H_{TB} = t \begin{pmatrix} 0 & g(\mathbf{k}) \\ g^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

Assim, podemos diagonalizar a matriz de forma a obter seus autovalores, ou seja, um espectro de energia dado por

$$E(\mathbf{k}) = \pm t |g(\mathbf{k})| \equiv \pm \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \quad (2.93)$$

onde $f(\mathbf{k}) = 4 \text{Cos}(3k_x a/2) \text{Cos}(k_y a \sqrt{3}/2) + 2 \text{Cos}(\sqrt{3}k_y a)$.

Figura 3 – Dispersão de energia no grafeno.



A Fig. 3 mostra a dispersão de energia na primeira zona de Brillouin do grafeno. Nas proximidades dos pontos K e K' , não há *gap* e a relação de dispersão (2.93) é aproximadamente linear. Dessa forma, um elétron nesta região do espaço recíproco comporta-se como uma quasi-partícula sem massa descrita pelo Hamiltoniano de Dirac, onde a relação de dispersão também é linear [27]. É possível ver isso ao fazer uma expansão de Taylor do fator de estrutura $g(\mathbf{k})$ em torno dos pontos K e K' . Para o primeiro, mantendo apenas os termos de primeira ordem, obtemos

$$g(\mathbf{k}) \approx g(\mathbf{K}) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_x} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} (k_x - K_x) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_y} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} (k_y - K_y) \quad (2.94)$$

$$= \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) \left(\frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.95)$$

$$= \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{-i\frac{5\pi}{6}} \quad (2.96)$$

onde definimos as coordenadas $k'_x = k_x - \frac{2\pi}{3a}$ e $k'_y = k_y + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$. De forma análoga para \mathbf{K}' , obtemos

$$g(\mathbf{k}) \approx \frac{3a}{2}(-k'_x - ik'_y)\left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad (2.97)$$

$$= \frac{3a}{2}(-k'_x - ik'_y)e^{-i\frac{5\pi}{6}}. \quad (2.98)$$

É possível, assim, ver que os pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' não são equivalentes.

Por fim, substituindo esses resultados na matriz (2.92), chegamos a conclusão que

$$H_D^\pm \approx \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \pm k_x - ik_y \\ \pm k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.99)$$

com $v_f = \frac{3ta}{2\hbar}$ denotando *velocidade de Fermi* e os sinais + e - referindo-se a elétrons de baixa energia nas vizinhanças de \mathbf{K} e \mathbf{K}' , respectivamente.

Pode-se notar que esta é a forma exata do Hamiltoniano de Dirac para uma partícula de velocidade v_f , ao invés da velocidade da luz. Em suma, encontramos que elétrons em baixa energia, no entorno dos pontos K e K' , apresentam um comportamento semelhante à férmions de Dirac sem massa.

2.5 Espinores em espaços-tempos curvos

Tendo em mente a definição de espinor e o porquê de precisarmos deles para descrever elétrons, é necessário acoplar estes objetos a espaços-tempos mais complexos. Em outras palavras, é necessário migrar a teoria de um espaço sem curvatura para um *Espaço Curvo*.

A princípio, deve-se aprender como descrever um espaço-tempo de forma geral. Para isto, é necessário postular que a geometria de um espaço-tempo qualquer é descrita pela sua métrica $g_{\mu\nu}$ [28], definida por

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^\mu dx^\nu. \quad (2.100)$$

A métrica é, em geral, simétrica sob os índices μ e ν e, portanto, contém 10 funções das coordenadas x^μ do espaço-tempo. É importante notar que não é possível definir um espaço-tempo geral a partir de uma transformação de coordenadas em um espaço-tempo plano inercial, como o espaço-tempo de Minkowski.

Suponha que se comece no espaço-tempo de Minkowski, cujas coordenadas inerciais sejam X^μ e a métrica $\eta_{\mu\nu}$. A partir daí, é possível fazer uma transformação para um novo sistema

de coordenadas x^α , que serão funções das coordenadas originais. A distância infinitesimal ds^2 em ambos casos pode então ser escrita como

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dX^\mu dX^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{\partial X^\mu}{\partial x^\alpha} \frac{\partial X^\nu}{\partial x^\beta} dx^\alpha dx^\beta = g_{\alpha\beta}(x) dx^\alpha dx^\beta. \quad (2.101)$$

Entretanto, a transformação de X^μ em x^α envolve apenas quatro funções das coordenadas. Assim, a métrica $g_{\alpha\beta}$ pode ter apenas quatro funções independentes. Isto vai contra o postulado inicial, no qual a métrica $g_{\alpha\beta}(x)$ tem dez funções independentes. Portanto, é impossível obter um $g_{\alpha\beta}(x)$ geral transformando as coordenadas do referencial inercial para o referencial não inercial. Analogamente, não é possível obter $\eta_{\mu\nu}$ a partir de uma transformação em $g_{\mu\nu}$.

Ainda assim, pode-se realizar uma transformações de coordenadas de sistemas não inerciais em outros sistemas não inerciais. Suponha um sistema de coordenadas x^μ , podemos escrever a métrica em um novo sistema x'^μ da forma

$$\begin{aligned} ds^2 &= g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \\ &= g_{\mu\nu} \frac{\partial x^\mu}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\beta} dx'^\alpha dx'^\beta \\ &= g'_{\alpha\beta} dx'^\alpha dx'^\beta, \end{aligned} \quad (2.102)$$

onde

$$g'_{\alpha\beta} = \frac{\partial x^\mu}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\beta} g_{\mu\nu}. \quad (2.103)$$

Da definição de Tensores, observa-se que a métrica é um *Tensor Contravariante de Segunda Ordem* (ou *rank 2*).

Apesar de não ser possível obter uma métrica de espaço-tempo plano a partir de uma transformação de coordenadas em um espaço-tempo curvo, pode-se definir para cada ponto um *Espaço de Minkowski Tangente*.

De maneira mais formal, considera-se um *Fibrado Tangente*⁴ TS no espaço-tempo, um espaço 8-dimensional que é localmente o produto direto do Espaço S e uma fibra típica que representa o Espaço Tangente. Para um espaço-tempo qualquer, a fibra típica é o espaço de Minkowski. A fibra é “típica” porque é um espaço de Minkowski “ideal” [30]. A relação entre a fibra de Minkowski típica e os espaços tangentes ao espaço-tempo é estabelecida pelas *Tetradas*.

As tetradas serão responsáveis por fazer uma cópia do espaço de Minkowski em cada espaço tangente. Para diferenciar, usam-se letras do alfabeto latino (i, j, etc), variando

⁴ É a união disjunta de todos os espaços tangentes de uma variedade diferencial [29].

de 0 a 4, para representar as componentes no espaço de Minkowski plano, e do alfabeto grego (μ, ν, \dots) para componentes do espaço-tempo curvo. Os primeiros recebem o nome de “índices de Minkowski”, enquanto os posteriores de “índices de Riemann”.

Assim, sejam K_i os vetores de base no espaço-tempo de Minkowski. Pode-se tomar a forma mais simples, dados por

$$\begin{aligned} K_0 &= (1, 0, 0, 0) \\ K_1 &= (0, 1, 0, 0) \\ K_2 &= (0, 0, 1, 0) \\ K_4 &= (0, 0, 0, 1). \end{aligned} \quad (2.104)$$

Dessa forma, as Tetradas, que denotaremos por e , serão responsáveis por um mapeamento do tipo

$$V : M \rightarrow TS, \quad V(K_i) = V_i \quad (2.105)$$

Assim, os quadrivetores V_i vão constituir uma base no espaço-tempo. Em suma, tem-se uma transformação da forma

$$\begin{array}{ccc} & V \text{ (Tetradas)} & \\ & \curvearrowright & \\ x^j K_i & & x^j V_i \\ & \curvearrowleft & \\ & V^{-1} & \\ \boxed{\text{espaço-tempo de}} & & \boxed{\text{espaço-tempo de}} \\ \boxed{\text{Minkowski Ideal}} & & \boxed{\text{Minkowski Tangente}} \end{array} \quad (2.106)$$

É possível ainda definir formas duais V^i , tal que

$$V_i V^j = \delta_i^j, \quad (2.107)$$

constituindo uma base no espaço-tempo tangente ao ponto no espaço-tempo curvo. Uma forma de definir estas bases é escrevendo em função de diferenciais exatas

$$V^i = e_\mu^i dx^\mu, \quad (2.108)$$

com

$$e_\mu^i e_i^\nu = \delta_\mu^\nu. \quad (2.109)$$

Assim, e_i^μ são as componentes das tetradas, possuindo uma inversa e_μ^i . Note que essas componentes possuem um índice no espaço-tempo de Minkowski e outro no espaço-tempo Curvo Geral.

Na prática, queremos transformar uma métrica geral em uma métrica com assinatura da métrica de Minkowski. Tomando, por exemplo, a métrica para a superfície bidimensional de uma Esfera, dada por

$$ds^2 = r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \quad (2.110)$$

podemos escrever na forma

$$ds^2 = (V^\theta)^2 + (V^\phi)^2, \quad (2.111)$$

tal que

$$\begin{aligned} V^\theta &= r d\theta \\ V^\phi &= r \sin \theta d\phi. \end{aligned} \quad (2.112)$$

A transformação nos levou a escrever os tensores métricos na forma

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix} \Rightarrow \eta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.113)$$

Dessa forma, em geral, temos uma transformação do tipo

$$g = g_{\mu\nu} dx^\mu \otimes dx^\nu \Rightarrow g = \eta_{\mu\nu} V^i \otimes V^j, \quad (2.114)$$

levando à uma métrica geral à forma mais simples

$$ds^2 = (V^0)^2 - (V^1)^2 - (V^2)^2 - (V^3)^2. \quad (2.115)$$

V^i é conhecido como *uma-forma de base*, pois é a base vetorial no espaço dual.

Por fim, observe que podemos escrever as componentes das Tetradas como uma forma matricial a partir de $V^i = e_\mu^i dx^\mu$, resultando em

$$e_\mu^i = \begin{pmatrix} r & 0 \\ 0 & r \sin \theta \end{pmatrix} \Rightarrow e_i^\mu = \begin{pmatrix} \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & \frac{1}{r \sin \theta} \end{pmatrix} \quad (2.116)$$

2.5.1 As formas diferenciais e as equações de Cartan

A vantagem de se trabalhar com as Tetradas é o método mais direto para se calcular curvatura utilizando as *equações de Cartan*. Nosso objetivo é encontrar as *uma-forma de curvatura* e os *coeficientes de Rotação de ricci*.

Dado um conjunto V^a de uma-forma base, queremos calcular as derivadas dV^a . Essas quantidades satisfazem a equação [31]

$$dV^a = -\omega_b^a \wedge V^b, \quad (2.117)$$

onde ω_b^a são chamados de *coeficientes de spin*. Essa é a chamada *equação de Cartan*, que é definida em função de um *Produto de Wedge*, definido por

$$\alpha \wedge \beta = \alpha \otimes \beta - \beta \otimes \alpha, \quad (2.118)$$

com α, β são Uma-Formas quaisquer, e \otimes denota o produto direto. Da definição é fácil ver que

$$\alpha \wedge \beta = -\beta \wedge \alpha \quad (2.119)$$

$$\alpha \wedge \alpha = 0 \quad (2.120)$$

Dessa forma, podemos criar Formas de ordens maiores, aplicando produtos de Wedge em Uma-formas, tal que um p -forma arbitrário pode ser escrito em termos de uma-formas bases ω^a como

$$\alpha = \frac{1}{p!} \alpha_{a_1 a_2 \dots a_p} \omega^{a_1} \wedge \omega^{a_2} \wedge \dots \wedge \omega^{a_p} \quad (2.121)$$

Voltando à equação (2.117), podemos escrever os uma-forma em função de uma base dx^μ , na forma

$$\omega_b^a = \omega_b^a{}_\mu dx^\mu. \quad (2.122)$$

Os coeficientes de conexão de spin $\omega_b^a{}_\mu$ serão de suma importância no cálculo da curvatura do espaço.

2.5.2 Equação de Dirac no espaço-tempo curvo

A interação entre o espinor e a curvatura pode ser obtida através de um procedimento chamado acoplamento mínimo [32, 33], que consiste em substituir a métrica de Minkowski na teoria no espaço-tempo Plano por uma métrica $g_{\mu\nu}$, dada por

$$\eta_{ab} \rightarrow g_{\mu\nu} = e_{\mu}^a e_{\nu}^b \eta_{ab}, \quad (2.123)$$

também, deve-se trocar as derivadas ordinárias por Derivadas Covariantes⁵ de *Fock-Ivanenko*, na forma [34]

$$\partial_a \rightarrow e_a^{\mu} D_{\mu} = e_a^{\mu} (\partial_{\mu} - \Gamma_{\mu}), \quad (2.124)$$

onde Γ_{μ} é chamado *conexão de spin*, e é dado por

$$\Gamma_{\mu} = \frac{1}{4} \omega_{\mu}^{ab} \gamma_a \gamma_b, \quad (2.125)$$

com ω_{μ}^{ab} sendo os coeficientes de conexão de spin, que podem ser obtidos através da equação de Cartan, e γ^a as matrizes gamma no espaço de Minkowski.

Dessa forma, a equação de Dirac toma a forma

$$(i\gamma^a e_a^{\mu} D_{\mu} - m)\psi(x) = 0. \quad (2.126)$$

Podemos ainda definir as Matrizes Gamma no espaço-tempo Curvo⁶ como

$$\underline{\gamma}^{\mu} = e_a^{\mu} \gamma^a, \quad (2.127)$$

as quais, satisfazem

$$\{\underline{\gamma}^{\mu}, \underline{\gamma}^{\nu}\} = 2g^{\mu\nu}. \quad (2.128)$$

Portanto, chega-se na generalização da *Equação de Dirac* para um *espaço-tempo Curvo*, dada por

$$(i\hbar \underline{\gamma}^{\mu} D_{\mu} - m)\psi(x) = 0 \quad (2.129)$$

Essa forma é vastamente utilizada no contexto da mecânica quântica relativística geral. O estudo dessa equação e suas suas soluções, no contexto da relatividade geral, remontam à década de 1940 [22, 35]. Desde então, essa área cresceu a medida que se exploravam soluções exatas e aproximadas em vários contextos estacionários [36–38] e cosmológicos [39, 40]. Klein e Collas [22] fornecem um conjunto mais completo de referências de aplicações neste cenário.

⁵ São chamadas Derivadas Covariantes pois são invariantes sob transformações de Lorentz locais nas coordenadas do espaço-tempo tangente.

⁶ O sublinhado é usado para diferenciar as matrizes no espaço plano e curvo.

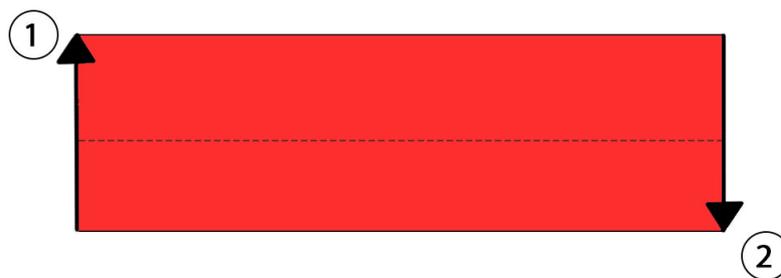
2.6 A fita de Möbius e suas propriedades

A *fita de Möbius* é uma superfície construída a partir de uma faixa, unindo um lado ao outro de forma que o resultado seja uma superfície unilateral. Ela foi descoberta de forma independente por dois matemáticos em 1858. August Ferdinand Möbius (1790 – 1868), matemático e astrônomo, e Johann Benedict Listing (1808 – 1882), um matemático mais jovem responsável por cunhar o termo “topologia” para o estudo de superfícies, determinaram independentemente as propriedades da faixa de Möbius[41].

Esta superfície é o exemplo mais simples de uma superfície não orientável. Isto significa que, se alguém vive em uma fita de Möbius, não consegue ter uma noção consistente de “sentido horário” que sirva para todos os pontos, pois ao dar uma volta ao redor da fita chegaria ao outro lado. Um cilindro, por exemplo, tem lados definidos sendo dito ser orientável. O conceito de orientabilidade é um conceito importante da topologia e de difícil entendimento, sendo a própria fita de Möbius útil como ferramenta para ilustrar essa ideia.

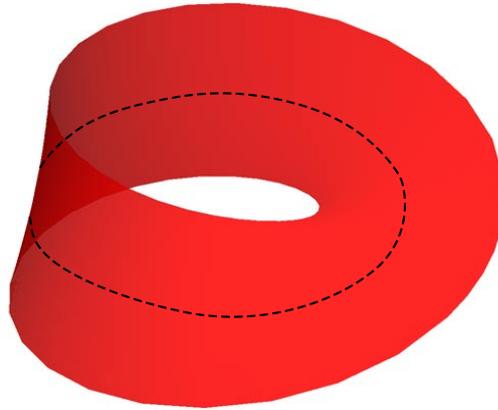
A Figura 4 ilustra como é possível construir uma fita de Möbius a partir de uma faixa. Unindo ambos os lados nas direções apresentadas pelas setas, de forma que se toquem os pontos 1 e 2, o resultado será como mostrado na Figura 5.

Figura 4 – Construção de uma fita de Möbius.



Esse tipo de estrutura possui ainda diversas aplicações na física, tais como um ressonador compacto com uma frequência de ressonância que é a metade da frequência de bobinas lineares construídas de forma idêntica [42], um resistor sem indução [43] e supercondutores com alta temperatura de transição [44].

Figura 5 – A fita de Möbius.



2.6.1 Coordenadas de superfície e métrica

Matematicamente, há muitas maneiras de descrever a geometria da fita de Möbius. Uma delas pode ser encontrada ao minimizar a energia elástica associada à deformação, resultando numa superfície desenvolvível, *i.e.*, pode ser desenrolada num plano implicando em uma curvatura intrínseca nula, o qual se aproxima do modelo *físico* para a fita. Contudo, depara-se com a dificuldade de que esta modelação descreve a superfície por meio de equações algébricas diferenciais, tornando a sua investigação mais complexa.

Uma forma mais simples de modelar a faixa de Möbius é gerar uma superfície a partir da rotação de uma reta, onde um segmento perpendicular a ela é escolhido e o plano formado é rotacionado em torno da reta fixa. Ao mesmo tempo, o segmento é rotacionado em torno do seu ponto médio, de tal modo que a velocidade angular seja metade da primeira rotação. O resultado será uma superfície com apenas um lado, com a torção desejada.

Finalmente, ao definir um sistema de coordenadas tal que a reta fixa é o eixo z , encontramos as equações paramétricas que descrevem a superfície gerada.

$$\mathbf{r}(u, \theta) = \left(a + u \cos \frac{\theta}{2} \right) \cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \left(a + u \cos \frac{\theta}{2} \right) \sin \theta \hat{\mathbf{j}} + u \sin \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{k}} \quad (2.130)$$

$$= \left(a + u \cos \frac{\theta}{2} \right) \hat{\mathbf{r}} + u \sin \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{k}} \quad (2.131)$$

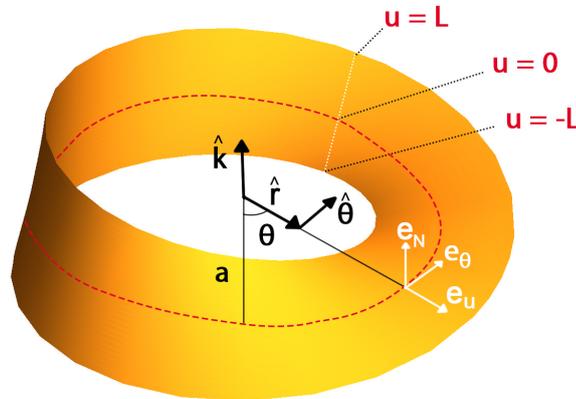
onde $-L \leq u \leq L$ varia ao longo da largura da fita e a coordenada angular $0 \leq \theta \leq 2\pi$. O parâmetro u mede a distância de algum ponto da superfície em relação ao círculo interno. Assim, a faixa tem largura $d = 2L$. O parâmetro a mede o raio do círculo central. O vetor unitário radial é dado por $\hat{\mathbf{r}} = \cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \hat{\mathbf{j}}$.

Esta parametrização descreve uma fita ideal, onde a dobra feita para colar as pontas da fita é feita uniformemente, o que nem sempre acontece fisicamente. Trabalha-se, portanto, com uma aproximação da fita de Möbius construída em laboratório.

Nota-se, a princípio, as propriedades de periodicidade da fita. De fato, é possível notar que ao fazer uma volta completa pela fita, a coordenada z (na direção de \mathbf{k}) muda de sinal. Também, encontramos a mesma posição que teríamos ao trocar o sinal do parâmetro u .

Será utilizado um sistema de unidades onde a distância é medida em termos de L , o qual chamaremos de uL (*unidade de Largura*), de forma que u irá variar de -1 a 1 .

Figura 6 – Coordenadas e vetores base na fita de Möbius.



É possível ainda criar uma base vetorial móvel a partir da base fixa com o uso de vetores tangentes, definidos como $e_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i}$, como ilustrado na Figura 6. Tem-se então

$$e_u = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} = \cos \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{r}} + \sin \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{k}} \quad (2.132)$$

$$e_\theta = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = \left(a + u \cos \frac{\theta}{2} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} - \frac{u}{2} \sin \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{r}} + \frac{u}{2} \cos \frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{k}}. \quad (2.133)$$

Dessa forma, é possível definir uma métrica que descreva a superfície da fita. Temos

$$g_{ij} = e_i \cdot e_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \beta^2(u, \theta) \end{pmatrix}, \quad (2.134)$$

onde $\beta(a, u, \theta) = \sqrt{\frac{u^2}{4} + (a + u \cos \frac{\theta}{2})^2}$. Assim, é possível escrever a métrica que descreve a superfície bidimensional como

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j = du^2 + \beta^2(u, \theta) d\theta^2 \quad (2.135)$$

Por fim, queremos estudar como a curvatura se distribui ao longo da superfície. Para isto, usamos das definições de curvatura gaussiana e média de uma superfície.

A Curvatura Gaussiana é uma propriedade intrínseca de um espaço que independe do sistema de coordenadas usado para descrevê-lo. Ela mede a curvatura intrínseca a uma superfície bidimensional. Do mesmo modo, a Curvatura Média, M , mede a curvatura de uma superfície quando está submersa no espaço tridimensional euclidiano, e por esta razão é chamada de curvatura extrínseca. Para a superfície da faixa de Möbius, temos

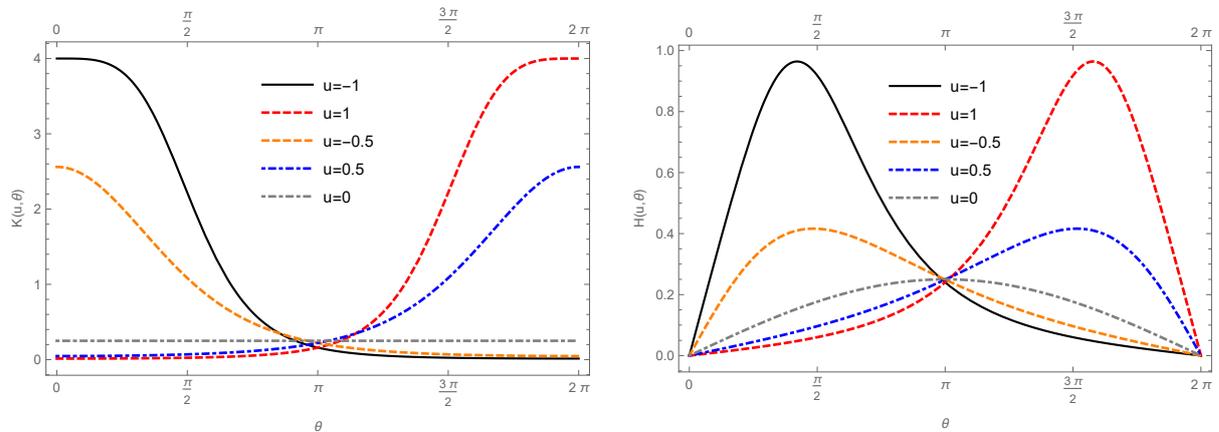
$$M = g^{ij}b_{ij} = \frac{2(2(a^2 + u^2) + 4au\cos\frac{\theta}{2} + u^2\cos\theta)\sin\frac{\theta}{2}}{(4a^2 + 3u^2 + 2u(4a\cos\frac{\theta}{2} + u\cos\theta))^{\frac{3}{2}}} \quad (2.136)$$

$$K = \frac{b}{g} = -\frac{1}{\beta^2}\partial_u^2\beta = -\frac{4a^2}{(4a^2 + u^2 + 8au\cos\theta + 4u^2\cos^2\theta)^2}, \quad (2.137)$$

onde b_{ij} é chamado a segunda forma fundamental.

A Figura 7 mostra as curvaturas Gaussiana e Média para alguns pontos da faixa em que o parâmetro u foi fixado, e o raio a foi tomado como 1. Fisicamente, isto refere-se a um anel de largura muito pequena.

Figura 7 – Curvaturas Gaussiana e Média em pontos da Fita de Möbius.



Observa-se que a curvatura acentua-se em pontos próximos às bordas, principalmente nas regiões para $\theta = \frac{\pi}{2}$ e $\theta = \frac{3\pi}{2}$. Se analisarmos a paridades dessas funções, obteve-se que a curvatura Gaussiana é uma função par, enquanto a curvatura média tem paridade ímpar. Ambas funções se repetem em um intervalo de 4π .

3 METODOLOGIA

3.1 Breve revisão dos modelos intrínseco e extrínseco

Há diversas formas de acoplar partículas com *spin* à curvatura. Uma das primeiras formas desenvolvidas é o modelo proposto por Da Costa [7], onde uma partícula é restrita a uma superfície, que está em um espaço tridimensional euclidiano, devido a um potencial externo atrativo, dependente das curvaturas Gaussiana e Média da superfície. A abordagem trata de uma única partícula em baixas energias, visto que se utiliza da equação de Schrödinger para tal.

Para uma dada parametrização da superfície $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x, y)$, é possível separar a equação de Schrödinger em uma parte normal e tangente à superfície. Na superfície, a dinâmica da partícula é dada por

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_S \right) \psi(x, y) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.1)$$

onde

$$V_S = -\frac{\hbar^2}{2m} (H^2 - K) \quad (3.2)$$

é chamado *Potencial Da Costa*, responsável por restringir a função de onda à superfície. H e K se referem às curvaturas, respectivamente. Este potencial é atrativo para qualquer superfície suave.

Outra abordagem é a generalização do modelo de Da Costa para a equação de Dirac, desenvolvida por Burgess e Jensen [8]. Nas mesmas condições, tem-se uma superfície em espaço tridimensional e a partícula é restrita a partir de um potencial confinante. A dinâmica da partícula é descrita pela equação de Dirac na forma

$$(\gamma^a D_a + \mu \gamma^3 + m) \psi = 0, \quad (3.3)$$

onde mostraram que μ tem dimensões e propriedades de uma massa efetiva, definido em termos da curvatura média,

$$\mu = \frac{H}{2}. \quad (3.4)$$

Para um limite não relativístico, encontraram o potencial efetivo dado por

$$V_{BJ} = -\frac{H^2}{8m}. \quad (3.5)$$

3.2 Acoplamento mínimo com a curvatura

Existe ainda uma abordagem onde se acoplam intrinsecamente os espinores à curvatura, de forma que, diferentemente dos modelos anteriores onde a superfície vive em um espaço tridimensional e a partícula é submetida a um potencial confinante até que seu movimento se restrinja à superfície, tem-se agora um modelo onde a terceira dimensão não existe, acessível à partícula apenas os pontos da superfície. A interpretação física desse modelo é que a partícula já está confinada e queremos investigar os efeitos da curvatura apenas neste âmbito.

3.2.1 Equação de Dirac em 2+1 dimensões para superfícies arbitrárias

Aplicamos este procedimento para o caso bidimensional em uma superfície arbitrária. Seja uma superfície bidimensional no espaço-tempo descrita pela métrica $g_{\mu\nu}(x^1, x^2)$, da forma

$$g_{\mu\nu}(x) = -dt^2 + A^2(x^1, x^2)(dx^1)^2 + B^2(x^1, x^2)(dx^2)^2. \quad (3.6)$$

É possível escrevê-la na forma

$$ds^2 = -(V^0)^2 + (V^1)^2 + (V^2)^2, \quad (3.7)$$

com

$$V^0 = dt \quad V^1 = A(x^1, x^2)dx^1 \quad V^2 = B(x^1, x^2)dx^2. \quad (3.8)$$

Essas são as *Dreibeins*¹. Fazendo $V^a = e^a_\mu dx^\mu$, chega-se portanto a

$$e^a_\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & A(x^1, x^2) & 0 \\ 0 & 0 & B(x^1, x^2) \end{pmatrix} \quad e^a_\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & A^{-1}(x^1, x^2) & 0 \\ 0 & 0 & B^{-1}(x^1, x^2) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Partindo de (2.129), escrevemos a equação de Dirac para uma partícula sem massa em 2+1 dimensões, dada por

$$ie^a_\mu \gamma^a D_\mu \psi(x) = 0 \quad (3.10)$$

Na literatura, é possível encontrar estudos que aplicam essa equação para diversas superfícies. Watanabe *et al.* [45] a estudaram para o Helicóide, uma superfície dada pela métrica

$$ds^2 = a \operatorname{Cosh}^2 u du^2 + a \operatorname{Cosh}^2 u d\theta^2. \quad (3.11)$$

¹ Do Alemão, *Drei* significa “Três”, pois formam uma base tridimensional no Espaço-Tempo. Para o espaço-tempo usual quadridimensional, as chamamos *Vierbeins*.

Onde a é o raio interno da superfície, u mede a distância de um ponto até o raio interno ao longo da superfície, e θ a coordenada angular. Esta superfície possui a simetria de que, rotacionando de um ângulo qualquer, esta terá a mesma forma. A consequência principal disto é que as funções $A(u, \theta)$ e $B(u, \theta)$ são, na verdade, funções apenas do parâmetro u .

Além disso, para superfícies com essa simetria, é possível fazer uma separação de variáveis, de forma que as componentes dos Espinores podem ser escritas como

$$\psi_i(u, \theta) = e^{i\ell\theta} \phi_i(u), \quad (3.12)$$

com ℓ sendo fisicamente o *momento angular* na direção de z , sendo uma quantidade conservada devido à simetria axial do helicóide. No entanto, este não é necessariamente quantizado.

A equação (3.10) aplicada ao Helicóide, para estados estacionários, pode ser encontrada no artigo de Watanabe *et al.*, leva a

$$\frac{i}{a \cosh u} \begin{pmatrix} 0 & \partial_u + i\partial_v + \frac{\tanh u \beta}{2} \\ \partial_u - i\partial_v + \frac{\tanh u}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

e usando a separação (3.12), chega-se a

$$\frac{i}{a \cosh u} \begin{pmatrix} 0 & \partial_u + \ell + \frac{\tanh u}{2} \\ \partial_u - \ell + \frac{\tanh u}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Este mesmo comportamento pode ser encontrado para o Cone [46], a Esfera [47] e a Catenoide [48].

3.3 Método de aproximação WKB

O método WKB² é uma abordagem que pode ser utilizada para encontrar soluções aproximadas da equação de Schrödinger. Consiste em aproximar a solução em determinadas regiões para um caso em que o potencial é constante ou varia lentamente.

Seguiremos a abordagem utilizada em [20]. A equação de Schrödinger em uma dimensão é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi. \quad (3.15)$$

² WKB representa as iniciais de *Wentzel, Kramers e Brillouin*

Para $V(x)$ constante, temos que a solução da equação em regiões onde $V > E$ ou $V < E$ é dada por

$$\psi(x) = A_1 e^{\pm ik_1 x} \quad (E > V) \quad (3.16)$$

$$\psi(x) = A_2 e^{\pm k_2 x} \quad (E < V), \quad (3.17)$$

onde

$$k_1 = \sqrt{2m(E - V)} \quad (3.18)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(V - E)} \quad (3.19)$$

Para $V(x)$ não constante, mas variando lentamente, a solução deve ter a mesma forma, mas agora a amplitude e k são funções de x . A equação de Schrödinger pode ser escrita na forma

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi, \quad (3.20)$$

com $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$. Se supormos que a função de onda deve ter a forma

$$\psi(x) = A(x) e^{iW(x)}, \quad (3.21)$$

então, ao substituir em (3.20) surgirão duas equações diferenciais, dadas por

$$\frac{d^2 A}{dx^2} - A \left(\frac{dW}{dx} \right)^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2} A \quad (3.22)$$

$$2 \frac{dA}{dx} \frac{dW}{dx} + A \frac{d^2 W}{dx^2} = 0 \quad (3.23)$$

A equação (3.23) pode ser facilmente solucionada, tem-se

$$\frac{d}{dx} \left(A^2 \frac{dW}{dx} \right) = 0 \Rightarrow A(x) = \frac{C}{\sqrt{W'}}, \quad (3.24)$$

onde $\frac{dW}{dx} \equiv W'$.

Para solucionar a equação (3.22), que não possui solução analítica simples, toma-se a aproximação

$$\frac{\partial^2 A}{\partial \theta^2} \ll A \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2, \quad (3.25)$$

isto é, a amplitude varia lentamente, de forma que a solução fica dada por

$$(W')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{dW}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar} \quad (3.26)$$

$$W(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx. \quad (3.27)$$

Portanto, a solução aproximada para a função de onda fica dada por

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad (3.28)$$

Esta solução se mostra uma boa aproximação para casos em que $E > V$ e $E < V$, no entanto, não funciona para regiões onde $E \approx V$, visto que a solução (3.28) diverge. Este problema é contornado supondo um potencial linear nas regiões de conexão entre as demais regiões, encontrando o que chamam-se de *fórmulas de conexão*.

Como veremos, este problema não será encontrado nas soluções desenvolvidas neste trabalho. O motivo para isso se trata da aplicação desta aproximação numa equação parecida com a equação de Schrödinger, mas que não é a própria, sendo apenas uma equação auxiliar para se chegar na solução. Desta forma, o surgimento de termos imaginários modificam a equação (3.23) e conseqüentemente obtêm-se uma solução válida para todas as regiões, não sendo necessário a utilização das fórmulas de conexão.

4 RESULTADOS

A partir deste ponto, tem-se por objetivo aplicar a metodologia desenvolvida à superfície que se deseja estudar, isto é, a fita de Möbius, considerando o modelo de acoplamento intrínseco de férmions à curvatura.

Inicialmente, consideremos a forma da métrica para a fita de Möbius em 2+1 dimensões,

$$ds^2 = -dt^2 + du^2 + \beta^2(a, u, \theta)d\theta^2. \quad (4.1)$$

É possível reescrevê-la como

$$ds^2 = -V^0 \otimes V^0 + V^1 \otimes V^1 + V^2 \otimes V^2, \quad (4.2)$$

de forma que,

$$V^0 = dt \quad (4.3)$$

$$V^1 = du \quad (4.4)$$

$$V^2 = \beta(a, u, \theta) d\theta \quad (4.5)$$

Assim, pode-se escrever a partir de (3.8) que

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \beta(a, u, \theta) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$$e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \beta^{-1}(a, u, \theta) \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

É possível então obter as conexões 1-forma por meio da equação de Cartan. Tem-se

$$dV^a = -\omega_b^a \wedge V^b, \quad (4.8)$$

e então,

$$dV^1 = 0 \Rightarrow \omega_2^1 \wedge V^2 = 0 \Rightarrow \omega_2^1 = 0 \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} dV^2 &= \partial_u \beta du \wedge d\theta = \frac{\partial_u \beta}{\beta} V^1 \wedge V^2 = -\omega_1^2 \wedge V^1 \\ &\Rightarrow \omega_1^2 = \frac{\partial_u \beta}{\beta} V^2 = \partial_u \beta d\theta \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ainda, a partir de $\omega^a_b = \omega^a_{\mu b} dx^\mu$, obtém-se que

$$\omega_{\theta}^2 = \partial_u \beta \quad (4.11)$$

Encontradas as conexões 1-forma, é fácil obter a conexão de Spin, dada por

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{4} \omega_\mu^{ab} \gamma_a \gamma_b, \quad (4.12)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \Gamma_\theta &= \frac{1}{4} \omega_\theta^{21} \gamma_2 \gamma_1 + \frac{1}{4} \omega_\theta^{12} \gamma_1 \gamma_2 \\ &= \frac{1}{2} \partial_u \beta \gamma_2 \gamma_1 \end{aligned} \quad (4.13)$$

As matrizes de Dirac no espaço-tempo curvo são dadas em função das matrizes no espaço plano,

$$\underline{\gamma}^\mu = e^\mu_a \gamma^a. \quad (4.14)$$

Para o espaço-tempo bidimensional da fita, encontra-se que

$$\underline{\gamma}^0 = e^0_a \gamma^a = \gamma^0 \quad (4.15)$$

$$\underline{\gamma}^1 = e^1_a \gamma^a = \gamma^1 \quad (4.16)$$

$$\underline{\gamma}^2 = e^2_a \gamma^a = \frac{1}{\beta} \gamma^2, \quad (4.17)$$

onde

$$(\gamma^0)^2 = -\mathbb{1} \quad (4.18)$$

$$(\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = \mathbb{1}. \quad (4.19)$$

A partir daí, tomando a equação (2.129), pode-se escrever a equação que descreve a dinâmica de férmions sem massa na Fita de Möbius, chegando a

$$\begin{aligned} i\hbar e^\mu_a \gamma^a D_\mu \psi &= 0 \\ i\hbar \left(\gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 D_1 + \frac{\gamma^2}{\beta} D_2 \right) \psi &= 0 \\ -i\hbar \gamma^0 \frac{\partial \psi}{\partial t} &= i\hbar \left(\gamma^1 D_1 + \frac{\gamma^2}{\beta} D_2 \right) \psi. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Multiplicando (4.66) por γ^0 e usando (4.18), obtém-se

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar \left(\gamma^0 \gamma^1 D_1 + \frac{\gamma^0 \gamma^2}{\beta} D_2 \right) \psi \quad (4.21)$$

Para estados estacionários, é possível fazer a seguinte separação de variáveis

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{iE}{\hbar}t} \varphi(\mathbf{r}). \quad (4.22)$$

Dessa forma, obtemos a equação usual para a ação do operador Hamiltoniano num autoestado de energia, dado por

$$H\varphi = E\varphi, \quad (4.23)$$

onde H se tornou

$$H = -i\hbar \left(\gamma^0 \gamma^1 D_1 + \frac{\gamma^0 \gamma^2}{\beta} D_2 \right). \quad (4.24)$$

Na literatura do Grafeno, o Hamiltoniano em (4.24) é geralmente escrito como

$$H = -i\hbar \left(\sigma^1 D_1 + \frac{\sigma^2}{\beta} D_2 \right), \quad (4.25)$$

de forma que podemos escolher uma representação das matrizes de Dirac tal que

$$\gamma^0 \gamma^1 = \sigma^1 \quad (4.26)$$

$$\gamma^0 \gamma^2 = \sigma^2, \quad (4.27)$$

com σ^i denotando as matrizes de Pauli, satisfazendo a relação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$. Pode-se então escolher

$$\gamma_1 = k_1 \sigma_2 \quad (4.28)$$

$$\gamma_2 = k_2 \sigma_1. \quad (4.29)$$

Escolhemos γ^0 , de forma que satisfaça (4.18), como

$$\gamma^0 = -i\sigma_3. \quad (4.30)$$

Assim, para satisfazer (4.26) e (4.27), escolhemos

$$\gamma^1 = -\sigma_2 \quad (4.31)$$

$$\gamma^2 = \sigma_1. \quad (4.32)$$

Portanto, o Hamiltoniano tem a forma

$$H = -i\hbar \left(\sigma^1 \partial_u + \frac{\sigma^2}{\beta} (\partial_\theta - \Gamma_\theta) \right). \quad (4.33)$$

Com a escolha das matrizes, a conexão de spin se torna

$$\begin{aligned}\Gamma_\theta &= \frac{1}{2}\partial_u\beta\gamma^2\gamma^1 \\ &= -\frac{1}{2}\partial_u\beta\sigma_1\sigma_2.\end{aligned}\quad (4.34)$$

No entanto, $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$, obtemos por fim

$$\Gamma_\theta = -\frac{i}{2}\partial_u\beta\sigma_3. \quad (4.35)$$

Consequentemente, encontramos que o Hamiltoniano para férmions na fita de Möbius será dado por

$$H = -i\hbar\left(\sigma^1\partial_u + \frac{\sigma^2}{\beta}\partial_\theta + \frac{i}{2}\frac{\partial_u\beta}{\beta}\sigma_2\sigma_3\right) \quad (4.36)$$

$$= -i\hbar\left(\sigma^1\partial_u + \frac{\sigma^2}{\beta}\partial_\theta - \frac{1}{2}\frac{\partial_u\beta}{\beta}\sigma_1\right). \quad (4.37)$$

Portanto, encontramos a forma do operador de energia que descreve a dinâmica de férmions sem massa confinados à superfície bidimensional de Möbius. Esse é o ponto chave do formalismo, uma vez que a partir de (4.37), é possível estudar os níveis de energia permitidos para a partícula em questão, bem como o estado quântico que as descreve. Também é possível adicionar termos de correção ou perturbação.

Antes de prosseguir, é interessante fazer uma análise quanto a hermiticidade do Hamiltoniano. Pode-se escrever

$$H = -i\hbar\left(\sigma^1\partial_u + \frac{\sigma^2}{\beta}\partial_\theta - \frac{1}{2}\frac{\partial_u\beta}{\beta}\sigma_1\right) \quad (4.38)$$

$$= -i\left(\left(\partial_u - \frac{1}{2}\frac{\partial_u\beta}{\beta}\right)\gamma^2 - \frac{\gamma^1}{\beta}\partial_\theta\right) \quad (4.39)$$

Usando a relação $(\gamma^i)^\dagger = \gamma^0\gamma^i\gamma^0$, tem-se que

$$(\gamma^1)^\dagger = -\sigma^2 \quad (4.40)$$

$$(\gamma^2)^\dagger = \sigma^1. \quad (4.41)$$

Assim,

$$H^\dagger = -i\left(\left(\partial_u - \frac{1}{2}\frac{\partial_u\beta}{\beta}\right)\sigma^1 + \frac{\sigma^2}{\beta}\partial_\theta\right) = H, \quad (4.42)$$

mostrando que o Hamiltoniano é de fato Hermitiano.

A equação de Dirac, por fim, se torna

$$H \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

com $\varphi_{1,2}(\mathbf{r}) = \varphi_{1,2}(u, \theta)$.

A equação (4.43) pode ser escrita em uma forma matricial, dada por

$$-i \begin{pmatrix} 0 & \partial_u + \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \\ \partial_u - \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

É possível desacoplar as componentes do espinor ao aplicar novamente o operador Hamiltoniano na esquerda de ambos lados da igualdade. Encontramos que

$$\begin{pmatrix} D_- D_+ & 0 \\ 0 & D_+ D_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = -E^2 \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

onde $D_\pm = \partial_u \pm \frac{i}{\beta} \partial_\theta + \frac{\partial_u \beta}{2\beta}$. De forma explícita, obtemos

$$\left(\partial_u - \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \left(\partial_u + \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \varphi_1 = -E^2 \varphi_1 \quad (4.46)$$

$$\left(\partial_u + \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \left(\partial_u - \frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \varphi_2 = -E^2 \varphi_2 \quad (4.47)$$

Desse modo, obtivemos em (4.46) e (4.47) duas equações diferenciais desacopladas para as duas componentes do espinor. Para solucioná-las, não é possível fazer uma separação da forma encontrada na equação (3.12), como se pode fazer no caso do Helicoide. Isto acontece pois, na Fita de Möbius, o momento angular não é conservado devido à ausência de uma simetria axial. Isto é facilmente constatado pela dependência em θ da função $\beta(u, \theta)$.

Assim, tendo em vista a complexidade da análise, investigamos o comportamento dos Espinores para casos em que se fixam $\theta = \theta_0$ e $u = u_0$, isto é, ao longo de fios e anéis na fita, respectivamente. Ao fixar coordenadas estamos, fisicamente, reduzindo as dimensões da fita em torno destes caminhos. Para o caso em que a partícula se move em torno de um anel, a largura da fita em torno deste anel tende a zero.

4.1 Espectro de energia ao longo da largura

Ao longo de um fio na direção transversal à coordenada angular, tomando um valor fixo para o parâmetro θ , as equações (4.46) e (4.47) têm por solução funções do parâmetro u ,

com $\beta = \beta(u, \theta_0)$ e $\partial_u \beta = \frac{\partial \beta(u, \theta)}{\partial u} |_{\theta = \theta_0}$. Temos que

$$\left(\partial_u - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \left(\partial_u - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \varphi_i = -E^2 \varphi_i, \quad (4.48)$$

onde i pode assumir os valores 1 ou 2. Isso leva a

$$\partial_u^2 \varphi_i - \left(\frac{\partial_u \beta}{\beta} \right) \partial_u \varphi_i + \left[\left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right)^2 - \partial_u \left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) + E^2 \right] \varphi_i = 0, \quad (4.49)$$

A fim de resolver a equação, consideramos uma transformação na função de onda do tipo

$$\varphi_i(u) = A(u) \chi_i(u), \quad (4.50)$$

de maneira que $A(u)$ satisfaz

$$\frac{\partial_u A}{A} = \frac{\partial_u \beta}{2\beta}. \quad (4.51)$$

A equação diferencial pode então ser reescrita como

$$-\frac{d^2 \chi_i(u)}{du^2} = E^2 \chi_i(u). \quad (4.52)$$

Assim, é possível ver que ao longo de um fio situado em $\theta = \theta_0$, o potencial efetivo devido à curvatura é nulo. Isso se deve à própria forma como construímos a fita: uma *superfície regradada*, ou seja, formada pela união de retas. Portanto, ao longo de uma dessas retas, espera-se que não haja nenhuma curvatura com a qual o férmion possa interagir.

A forma da função da onda é finalmente dada por

$$\begin{aligned} \varphi_i(u, \theta_0) &= \exp \left(\int^u \frac{\partial_u \beta}{2\beta} du' \right) \left[a \cos(Eu) + b \sin(Eu) \right] \\ &= \beta^2(u, \theta_0) \left[A \cos(Eu) + B \sin(Eu) \right]. \end{aligned} \quad (4.53)$$

É fácil notar que, após duas voltas em torno da fita, a função de onda terá a mesma forma. Em adição, impomos a condição de que a função de onda seja nula nas bordas, uma vez que o potencial fora da fita é infinito, fazendo com que a partícula continue confinada. Esse problema é análogo à partícula em uma caixa com uma barreira de potencial infinito. Temos, então

$$\varphi_i(u = L, \theta_0) = \varphi_i(u = -L, \theta_0) = 0, \quad (4.54)$$

resultando em $A = 0$ e $\text{Sin}(EL) = 0$, nos levando, assim, à condição de quantização da energia, dada por

$$En = \frac{n\pi}{L}. \quad (4.55)$$

Dessa forma, encontramos que o espectro de energia da partícula confinada ao longo da largura da fita depende apenas de sua extensão. Além disso, a função de onda tem a forma dada por

$$\varphi_1(u, \theta_0) = C \left(\frac{u^2}{4} + (a + u \cos \frac{\theta_0}{2})^2 \right) \text{Sin} \left(\frac{n\pi}{L} u \right) \quad (4.56)$$

A função de onda normalizada é mostrada na Fig. 8 para os cinco primeiros níveis de energia, tomando o raio interno como $a = 1$. É possível notar a tendência da partícula em se localizar nas regiões onde há maior curvatura, pois se olharmos para a Figura 7, podemos ver claramente as regiões de $\pi/2$ e $3\pi/2$ com maior curvatura nas bordas da faixa.

4.2 Espectro de energia ao longo de um anel

Analisemos agora o comportamento dos espinores para o caso em que o parâmetro $u = u_0$ é fixo, fazendo com que a partícula se mova em torno de um anel muito fino (largura tendendo a zero).

As equações diferenciais são então dadas por funções de θ , uma vez que agora $\beta = \beta(u_0, \theta)$ e $\partial_u \beta = \frac{\partial_u(u, \theta)}{\partial u} |_{u=u_0}$. Temos

$$\left(\frac{i}{\beta} \partial_\theta + \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \left(\frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \varphi_1 = -E^2 \varphi_1 \quad (4.57)$$

$$\left(\frac{i}{\beta} \partial_\theta + \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \left(\frac{i}{\beta} \partial_\theta - \frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \varphi_1 = -E^2 \varphi_1, \quad (4.58)$$

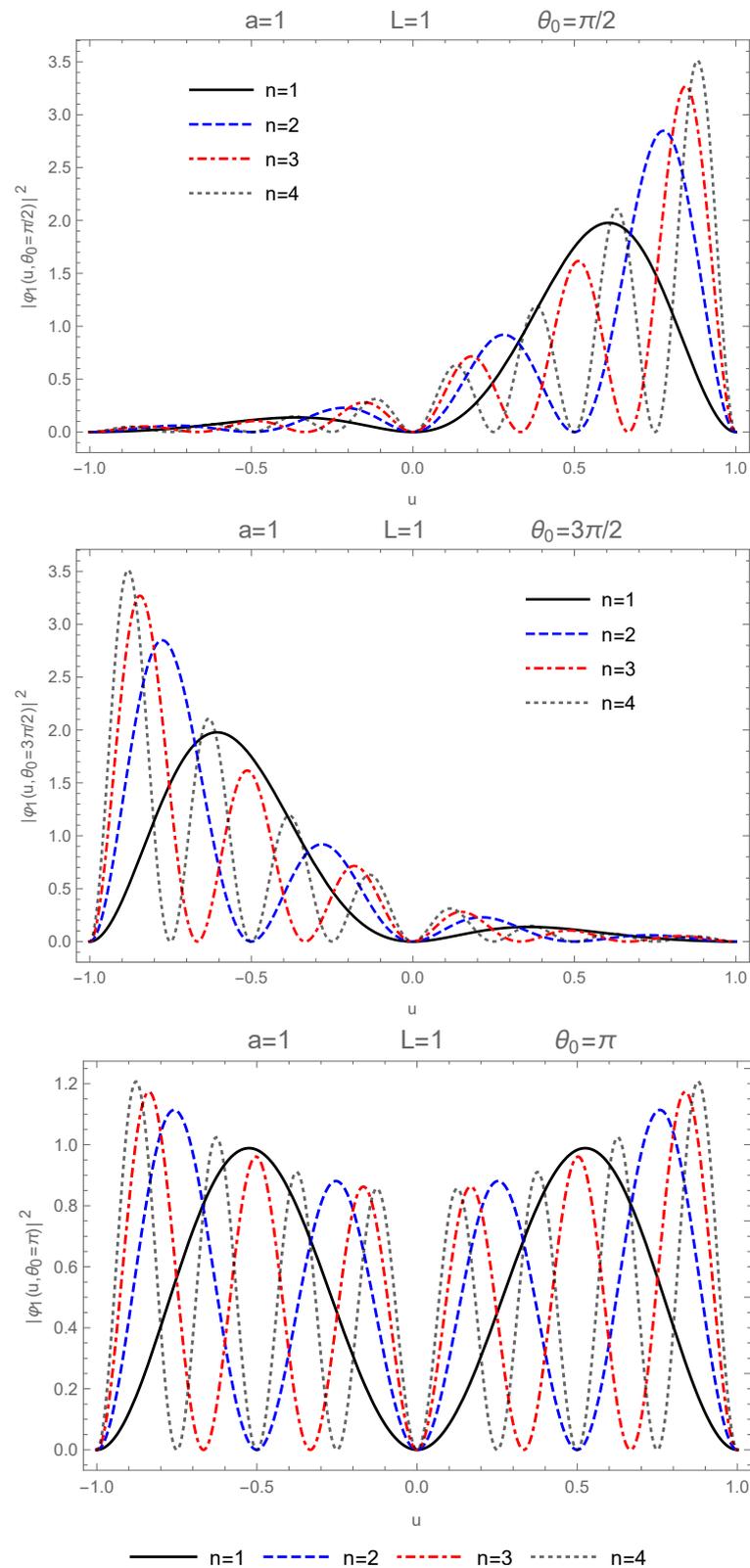
o que leva a

$$-\frac{\partial_\theta^2 \varphi_1}{\beta^2} + \left(\frac{\partial_\theta \beta}{\beta^3} \right) \partial_\theta \varphi_1 + V(\theta) \varphi_1 = E^2 \varphi_1 \quad (4.59)$$

$$-\frac{\partial_\theta^2 \varphi_2}{\beta^2} + \left(\frac{\partial_\theta \beta}{\beta^3} \right) \partial_\theta \varphi_2 + V^*(\theta) \varphi_2 = E^2 \varphi_2, \quad (4.60)$$

com o potencial efetivo definido por $V(\theta) = - \left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right)^2 - \frac{i}{\beta} \partial_\theta \left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta} \right) \equiv V_R(\theta) + iV_{Im}(\theta)$. Note que, se β não depende de θ , então não há termo imaginário no potencial, como se verifica em outras superfícies bidimensionais dotadas de simetria axial.

Figura 8 – Quadrado da Função de Onda ao longo da Largura para valores de θ_0 fixos.



Podemos escrever as equações (4.59) e (4.60) em uma forma conveniente do tipo equação de Schrödinger com o intuito de identificar o potencial no qual a partícula está sujeita.

Para isso, nós consideramos a mudança de variável $\theta \rightarrow v(\theta)$, tal que $\frac{dv}{d\theta} = \beta(u_0, \theta)$. Essa transformação tem motivos geométricos, uma vez que simplifica a métrica, pois temos que $\beta^2 d\theta^2 = dv^2$.

A função de onda para cada espinor é então dada por

$$\left(-\frac{d^2}{dv^2} + V(v)\right)\varphi_1(v) = E^2\varphi_1(v) \quad (4.61)$$

$$\left(-\frac{d^2}{dv^2} + V^*(v)\right)\varphi_2(v) = E^2\varphi_2(v). \quad (4.62)$$

É possível notar a similaridade com a equação de Schrödinger, mas com autovalor E^2 . Assim, é possível interpretar $V(v)$ como um potencial efetivo induzido, sentido pela partícula devido à curvatura.

A nova variável $v(\theta)$ pode finalmente ser totalmente determinada ao impormos que os zeros entre ambas coordenadas coincidem, isto é, $\theta = 0 \rightarrow v = 0$, de maneira que podemos escrever

$$v(\theta) = \int_0^\theta \beta(u_0, \theta') d\theta'. \quad (4.63)$$

De agora em diante, queremos resolver as equações diferenciais para ambos os componentes do spinor. Para tal, focamos em encontrar a solução para (4.61), de modo que só precisamos fazer $V_{Im} \rightarrow -V_{Im}$ para obter a solução para (4.62). A fim de solucionar a equação, utilizamos o método de aproximação WKB para estimar o espectro de energia, bem como as autofunções correspondentes. Tomamos assim uma forma de onda com amplitude e fase variável do tipo

$$\varphi(v) = A(v) e^{iW(v)}, \quad (4.64)$$

o que leva a duas equações,

$$\frac{\partial^2 A}{\partial v^2} - A \left(\frac{\partial W}{\partial v}\right)^2 = -(E^2 - V_R)A \quad (4.65)$$

$$A \frac{\partial^2 W}{\partial v^2} + 2 \frac{\partial A}{\partial v} \frac{\partial W}{\partial v} = V_{Im} A. \quad (4.66)$$

Neste ponto podemos usar o método da aproximação WKB ao considerar que $\frac{\partial^2 A}{\partial v^2} \ll A \left(\frac{\partial W}{\partial v}\right)^2$, o que significa fisicamente que o potencial varia lentamente com o tempo. A solução da equação (4.66) é então

$$\begin{aligned} W_{1,2}(v) &= \pm \int^v \sqrt{E^2 - V_R(v')} dv' \\ &= \pm \int^v \sqrt{E^2 + \left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta}\right)^2} dv' \equiv \int^v p(v') dv', \end{aligned}$$

onde usaremos a convenção $W_1(v) = W(v)$, $W_2(v) = -W(v)$. Assim, a equação (4.65) se torna

$$\frac{\partial A}{\partial v} = \frac{V_{Im} - W''}{2W'} A, \quad (4.67)$$

onde tomamos por simplicidade $W' = \frac{\partial W}{\partial v}$ e $W'' = \frac{\partial^2 W}{\partial v^2}$. A solução da equação (4.67) é então

$$A_1(v) = \exp \left[- \int^v \frac{V_{Im} + W''}{2W'} dv \right] \equiv e^{g(v)} \quad (4.68)$$

$$A_2(v) = \exp \left[\int^v \frac{V_{Im} - W''}{2W'} dv \right] \equiv e^{h(v)}. \quad (4.69)$$

A solução geral pode ser escrita como

$$\varphi_1(v) = c_1 e^{g(v)} e^{-iW(v)} + c_2 e^{h(v)} e^{iW(v)}. \quad (4.70)$$

É importante notar que, diferentemente da solução encontrada ao aplicar a aproximação WKB no caso usual para a equação de Schrödinger, não há divergência nos pontos de retorno clássico para o cenário tratado aqui. De fato, a solução encontrada tem a mesma forma para qualquer região ($E < V_R$, $E > V_R$, and $E = V_R$).

A forma da função também sugere ondas propagando vindo da esquerda e da direita, cujas amplitudes variam com v de maneiras diferentes, isto é, $g(v)$ e $h(v)$. Pode-se observar que a anisotropia entre a propagação dessas ondas está sendo gerada pela parte imaginária do potencial, pois se escrevermos

$$\varphi_1(v) = e^{g(v)} \left(c_1 e^{-iW(v)} + c_2 e^{h(v)-g(v)} e^{iW(v)} \right), \quad (4.71)$$

vemos que $h(v) - g(v)$ é dado por

$$\begin{aligned} h(v) - g(v) &= \int^v dv \left(\frac{V_{Im} - W''}{2W'} + \frac{V_{Im} + W''}{2W'} \right) \\ &= \int^v dv \frac{V_{Im}}{W'}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Essa anisotropia quebra a periodicidade da função de onda. Assim, a fim de encontrar estados que descrevem um pacote de onda propagando periodicamente, desprezamos $h(v) - g(v)$, de forma que podemos escrever a solução como

$$\begin{aligned} \varphi_1(v) &= \exp \left(- \int^v \frac{V_{Im}(v') + p'(v')}{p(v')} dv' \right) \left(c_1 e^{-iW(v)} + c_2 e^{iW(v)} \right) \\ &= \exp \left(- \int^v \frac{V_{Im}(v') + p'(v')}{p(v')} dv' \right) \left(b_1 \cos W(v) + b_2 \sin W(v) \right). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Podemos interpretar esse resultado como uma função de onda periódica com um amortecimento gerado por V_I . Note também que a onda é gerada a partir do momento $p(\theta)$, haja visto que

$$W(v) = \int^v p(v')dv' = \int^v \sqrt{E^2 - V_R(v')}dv'. \quad (4.74)$$

Note que ainda há uma fase arbitrária associada ao limite inferior de integração das funções $W(v)$ e $g(v)$. Tomamos então como zero o limite inferior, fazendo $W(0) = g(0) = 0$.

A geometria da fita sugere condições de contorno, para uma volta ao seu redor, da forma

$$\varphi_i(u, \theta) = \varphi_i(-u, \theta + 2\pi). \quad (4.75)$$

Nós então aplicamos esse resultado para os principais anéis da fita: o anel central e as bordas da fita.

4.2.1 *Espectro de energia e autofunções para o anel central*

Estudamos agora o espectro de energia, bem como autofunções, de uma partícula fermiônica restrita ao anel central da fita de Möbius. Como mencionado, é possível modelar fisicamente esta situação no cenário de uma largura muito pequena em comparação com o raio.

O anel central é caracterizado pelo parâmetro $u = 0$, de forma que agora temos

$$\beta(u_0 = 0, \theta) = a, \quad (4.76)$$

e o potencial efetivo que a partícula está sujeita, dado por

$$V(\theta) = V_R(\theta) + iV_{Im}(\theta), \quad (4.77)$$

com

$$V_R(\theta) = -\frac{1}{4a^2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (4.78)$$

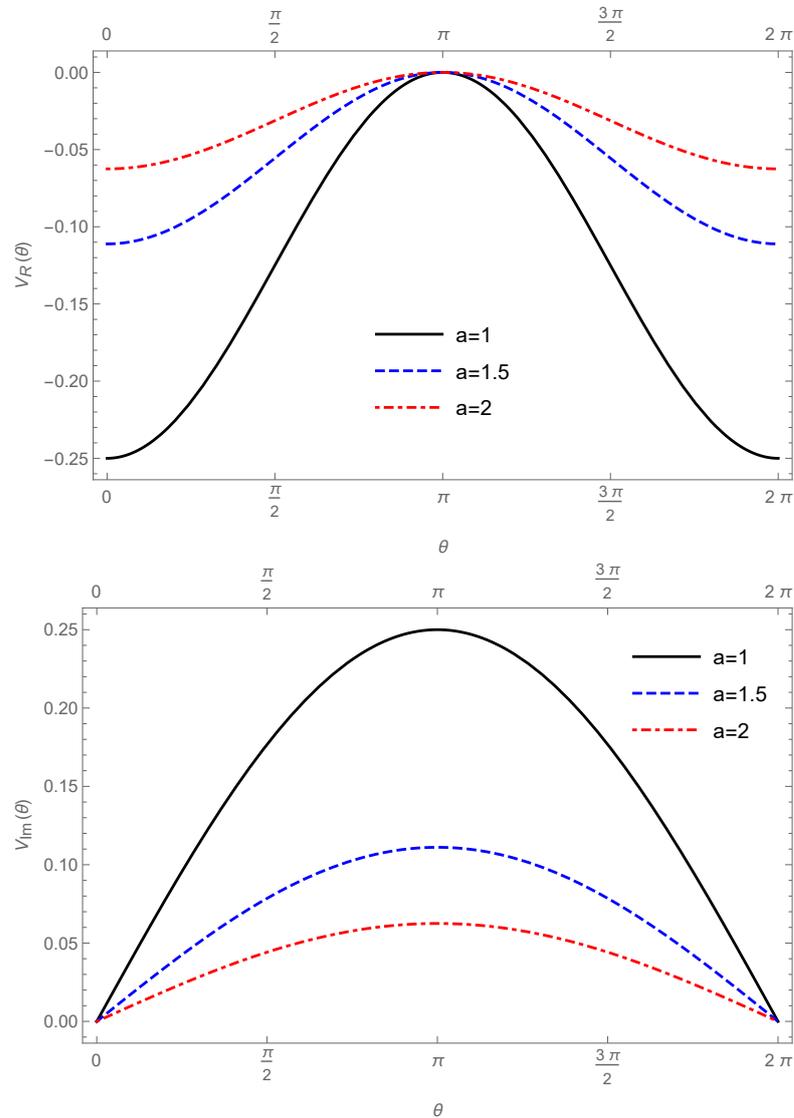
$$V_{Im}(\theta) = \frac{1}{4a^2} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4.79)$$

A Fig. 9 mostra o gráfico da parte real e imaginária do potencial em função de θ .

Também pode-se calcular o parâmetro $v(\theta)$ para o anel central, dado por

$$v(\theta) = \int_0^\theta a d\theta' = a\theta. \quad (4.80)$$

Figura 9 – Parte real e imaginária do potencial efetivo no anel central da fita de Möbius.



Portanto, é fácil de ver que o parâmetro v é o comprimento de um arco formado pelo ângulo θ na fita, de forma que varia de 0 a $2\pi a$ no anel central. Assim, a partir da equação (4.75), pode-se escrever as condições de contorno para a função de onda no anel central da fita em termos do parâmetro v , dado por

$$\varphi_1\left(0, \frac{v}{a}\right) = \varphi_1\left(0, \frac{v}{a} + 2\pi\right). \quad (4.81)$$

Se tomarmos como condição inicial $\varphi_1(0, \theta = 0) = 0$, a equação (4.73) se torna

$$\varphi_1(v) = A \exp\left(-\int_0^v \frac{V_{Im}(v') + p'(v')}{p(v')} dv'\right) \text{Sin } W(v). \quad (4.82)$$

Usando as condições de contorno no anel central, encontramos que as energias E_n^2

devem obedecer

$$\int_0^{2\pi a} p(v)dv = \int_0^{2\pi a} \sqrt{\frac{1}{4a^2} \cos^2 \frac{v}{2a} + E_n^2} dv = n\pi, \quad (4.83)$$

onde n é um número inteiro.

Portanto, encontramos a forma das funções de onda e as energias permitidas. Como mencionao, esse resultado também vale para a equação (4.62), sendo necessário apenas tomar $V_{Im} \rightarrow -V_{Im}$.

A partir da equação (4.83), é possível calcular as energias permitidas, as quais são mostradas na Tabela 1 para alguns valores para a .

Tabela 1 – Valores numéricos para os níveis de energia no anel central para diferentes valores de a .

n	E_n^2 (Valor Numérico)		
	$a = 1$	$a = 1.5$	$a = 2$
1	0.13287	0.059337	0.033473
2	0.87692	0.38973	0.21916
3	2.12585	0.944862	0.531498
4	3.87549	1.72241	0.968884
5	6.12531	2.72238	1.53131
...
10	24.8751	11.0556	6.21877
...

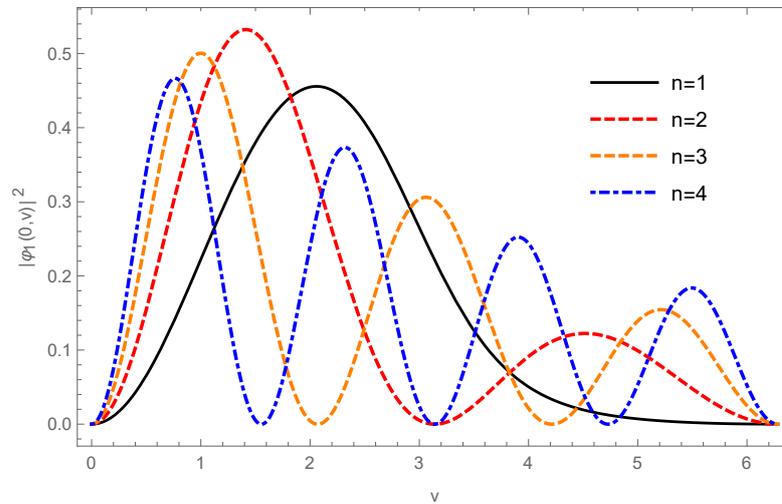
Pode-se observar que à medida que o raio da faixa aumenta, o valor das energias permitidas diminui, mantendo a mesma proporção entre os níveis de energia para o mesmo valor de a .

Finalmente, a figura 10 mostra o módulo quadrado da função de onda (4.82) para $a = 1$. É possível notar o efeito de *amortecimento* na curva senoidal, concentrando a partícula, de forma semelhante a uma barreira de potencial, em regiões onde há maior curvatura

4.2.2 Espectro de energia e autofunções nas bordas da fita

De forma análoga, estudamos o espectro de energia, junto de sua autofunções, para um férmion sem massa nas bordas da fita, isto é, regiões parametrizadas em $u = 1$ e $u = -1$.

Figura 10 – Módulo quadrado da função de onda no anel central da fita de Möbius.



Dada a complexidade dos cálculos utilizando o parâmetro ν , a partir de agora fixamos o raio dos anéis em $a = 1$.

Como discutido, o parâmetro ν mede o comprimento total do anel num dado u , levando a valores diferentes em cada borda. Claro que, a partir da geometria, a partícula ganha um sinal negativo no parâmetro u de sua posição após executar uma volta em torno da faixa, o que faz com que toda a borda seja apenas uma. No entanto, após executar duas voltas, voltamos à posição inicial, o que nos leva a ajustar as condições de contorno.

Se chamarmos C ao comprimento total da fita de Möbius para um determinado raio a e parâmetro u , podemos escrever a nossa condição de contorno adaptada como

$$\varphi_i(u, \nu) = \varphi_i(u, \nu + 2C). \quad (4.84)$$

Nas bordas, ν será dado por

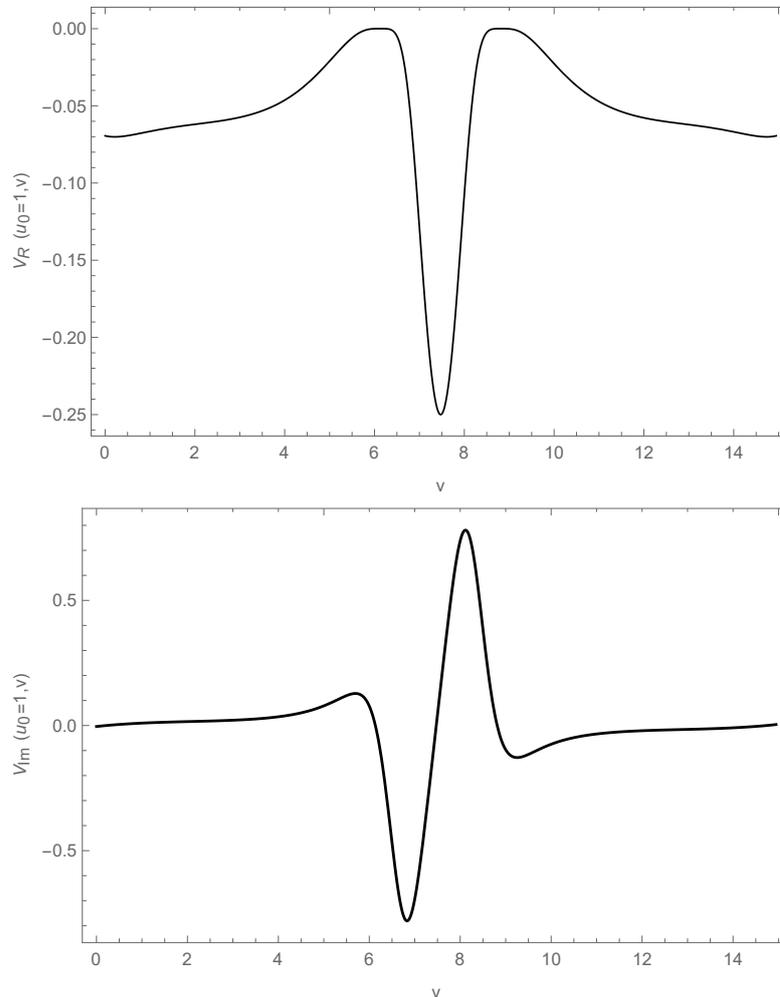
$$\nu(\theta)|_{u=1} = \int_0^\theta \sqrt{\frac{1}{4} + (1 + \cos\theta')^2} d\theta' \quad (4.85)$$

$$\nu(\theta)|_{u=-1} = \int_0^\theta \sqrt{\frac{1}{4} + (1 - \cos\theta')^2} d\theta'. \quad (4.86)$$

Assim, vemos que o valor numérico para o comprimento total da tira (ou seja, o valor do parâmetro ν para uma volta completa) é de cerca de 7,473, tendo para duas voltas o dobro deste valor. É então possível plotar o gráfico do potencial efetivo devido à curvatura em termos de ν , mostrado nas figuras 11 e 12. Nota-se que os potenciais para $u = 1$ e $u = -1$ são os mesmos, exceto por uma fase. Isto acontece porque temos apenas uma borda, além de que o

parâmetro u mede a distância entre o ponto e o círculo interior para um dado valor de θ . Dessa maneira, temos diferentes valores para ângulos diferentes.

Figura 11 – Parte real e imaginária do potencial efetivo nas bordas da fita em $u_0 = 1$ para um raio $a = 1$.



Se agora tomarmos condições iniciais análogas ao caso do anel central como $\varphi_1(0, \nu = 0) = 0$, a função de onda assume a mesma forma da equação (4.82). Agora, usando a condição (4.84), encontramos que os autovalores de energia devem obedecer

$$\int_0^{2C} \sqrt{E_n^2 - V(u_0, \nu)} \, d\nu = n\pi. \quad (4.87)$$

Dessa forma, métodos numéricos nos permitem calcular o espectro, o qual está disposto na Tabela 2. Não há valor de energia para o qual a integral se iguale a π , portanto o primeiro nível é encontrado para $n = 2$.

Finalmente, plotamos o módulo quadrado da função de onda, mostrados na Fig. 13. Pode-se observar que os valores para os quais a partícula pode ser encontrada com maior

Figura 12 – Parte real e imaginária do potencial efetivo nas bordas da fita em $u_0 = -1$ para um raio $a = 1$.

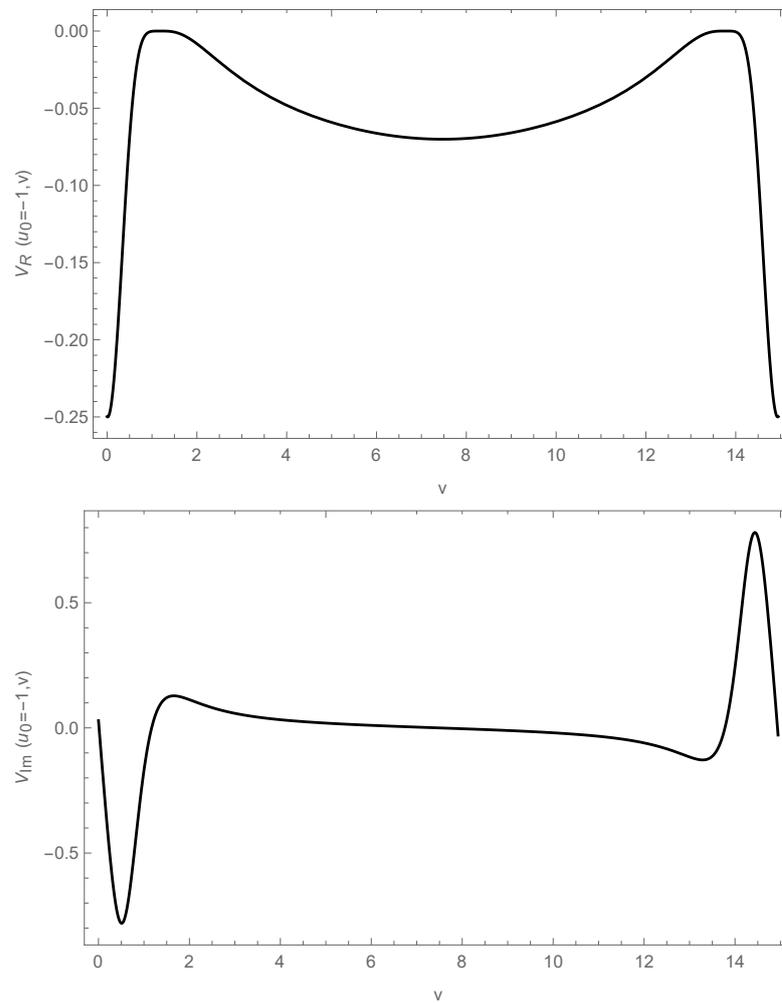
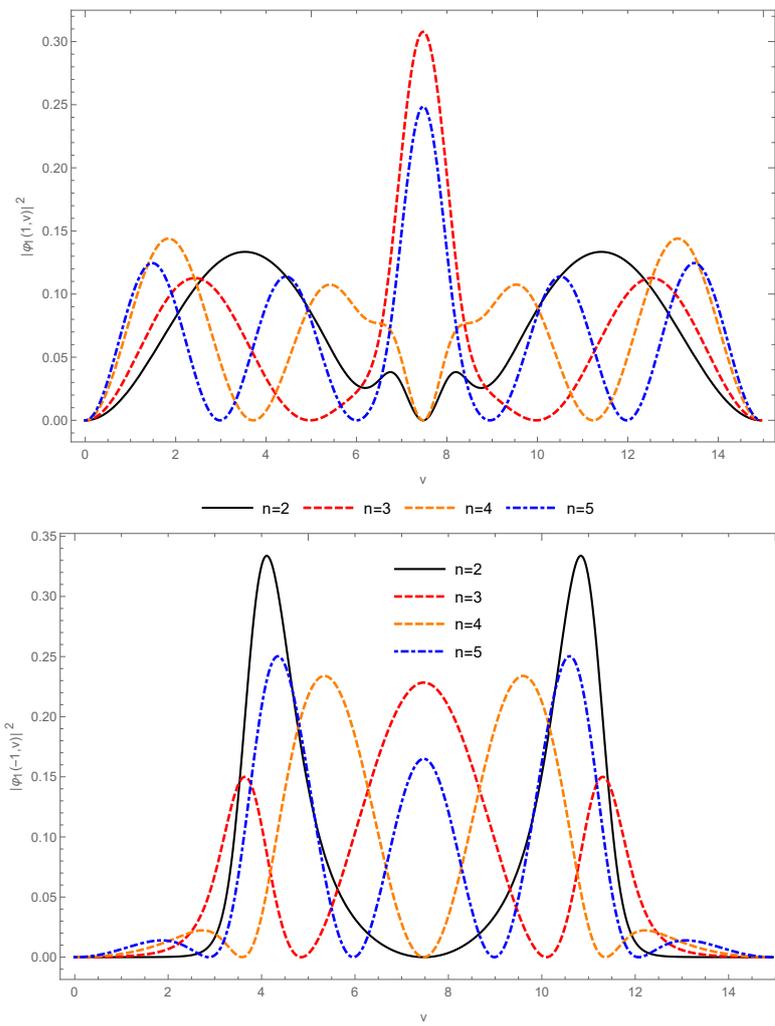


Tabela 2 – Valores numéricos para os níveis de energia para diferentes valores de u_0 e raio $a = 1$.

n	E_n^2 (Valor Numérico)	
	$u_0 = -1$	$u_0 = 1$
1	-	-
2	0.10023	0.122504
3	0.31649	0.341905
4	0.62399	0.65058
5	1.04995	1.0469
6	1.50621	1.5337
...
10	4.3329	4.3609
...

probabilidade correspondem claramente à pontos onde a curvatura é maior.

Figura 13 – Módulo quadrado da função de onda em $u = 1$ e $u = -1$.



5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho estudamos férmions relativísticos sem massa, restritos à Fita de Möbius e os efeitos da curvatura sobre sua dinâmica. Pode-se observar os efeitos de confinamento da curvatura, concentrando a função de onda a partir da formação de poços nas regiões onde a curvatura gaussiana e média são maiores. Vimos também como afetou a paridade e periodicidade da função $\beta(u, \theta)$, dos potenciais geométricos induzidos e as curvaturas. Foram comparados os resultados com outras superfícies, como o cone, a esfera, o helicóide e a catenoide, verificando o surgimento de termos imaginários no potencial devido à falta de simetria axial.

Extensões deste trabalho podem ser feitas ao considerar a ação de campos elétrico e magnético, investigando sua influência na dinâmica da partícula. Além disso, uma análise dos efeitos clássicos e quânticos relacionados a uma partícula restrita a fita pode ser feito, visto que classicamente o momento angular não é conservado.

REFERÊNCIAS

- [1] K. S. Novoselov. **Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films**. Em: *Science* 306.5696 (out. de 2004), pp. 666–669. DOI: <10.1126/science.1102896>. URL: <<https://doi.org/10.1126/science.1102896>>.
- [2] Humberto Terrones e Mauricio Terrones. **Curved nanostructured materials**. Em: *New Journal of Physics* 5 (out. de 2003), pp. 126–126. DOI: <10.1088/1367-2630/5/1/126>. URL: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/5/1/126>>.
- [3] Gordon W. Semenoff. **Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly**. Em: *Physical Review Letters* 53.26 (dez. de 1984), pp. 2449–2452. DOI: <10.1103/physrevlett.53.2449>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.53.2449>>.
- [4] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov e A. K. Geim. **Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene**. Em: *Nature Physics* 2.9 (ago. de 2006), pp. 620–625. ISSN: 1745-2481. DOI: <10.1038/nphys384>. URL: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys384>>.
- [5] Matthew Mecklenburg e B. C. Regan. **Spin and the Honeycomb Lattice: Lessons from Graphene**. Em: *Physical Review Letters* 106.11 (mar. de 2011). DOI: <10.1103/physrevlett.106.116803>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.106.116803>>.
- [6] A. H. Castro Neto et al. **The electronic properties of graphene**. Em: *Rev. Mod. Phys.* 81 (1 jan. de 2009), pp. 109–162. DOI: <10.1103/RevModPhys.81.109>. URL: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>>.
- [7] R. C. T. da Costa. **Quantum mechanics of a constrained particle**. Em: *Phys. Rev. A* 23 (4 abr. de 1981), pp. 1982–1987. DOI: <10.1103/PhysRevA.23.1982>. URL: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.23.1982>>.
- [8] Mark Burgess e Bjørn Jensen. **Fermions near two-dimensional surfaces**. Em: *Physical Review A* 48.3 (set. de 1993), pp. 1861–1868. DOI: <10.1103/physreva.48.1861>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physreva.48.1861>>.
- [9] E. W. S. Caetano et al. **Möbius and twisted graphene nanoribbons: Stability, geometry, and electronic properties**. Em: *The Journal of Chemical Physics* 128.16 (abr. de 2008), p. 164719. DOI: <10.1063/1.2908739>. URL: <<https://doi.org/10.1063/1.2908739>>.
- [10] Xianlong Wang et al. **Theoretical investigation of Möbius strips formed from graphene**. Em: *Applied Physics Letters* 97.12 (set. de 2010), p. 123103. DOI: <10.1063/1.3489982>. URL: <<https://doi.org/10.1063/1.3489982>>.
- [11] Xuqiang Zhang et al. **Construction of Möbius-strip-like graphene for highly efficient charge transfer and high active hydrogen evolution**. Em: *Journal of Catalysis* 354 (out. de 2017), pp. 258–269. DOI: <10.1016/j.jcat.2017.08.021>. URL: <<https://doi.org/10.1016/j.jcat.2017.08.021>>.

- [12] Kyriakos Flouris, Miller Mendoza Jimenez e Hans J. Herrmann. **Quantum spin-Hall effect on the Möbius graphene ribbon**. 2019. arXiv: <1902.03892> [cond-mat.mes-hall].
- [13] W. Beugeling, A. Quelle e C. Morais Smith. **Nontrivial topological states on a Möbius band**. Em: *Phys. Rev. B* 89 (23 jun. de 2014), p. 235112. URL: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.235112>>.
- [14] Zehao Li e L. R. Ram-Mohan. **Quantum mechanics on a Möbius ring: Energy levels, symmetry, optical transitions, and level splitting in a magnetic field**. Em: *Physical Review B* 85.19 (mai. de 2012). DOI: <10.1103/physrevb.85.195438>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.85.195438>>.
- [15] Kyriakos Flouris et al. **Confining massless Dirac particles in two-dimensional curved space**. Em: *Phys. Rev. B* 98 (15 out. de 2018), p. 155419. DOI: <10.1103/PhysRevB.98.155419>.
- [16] J. F. O. de Souza e Claudio Furtado. **On the confinement of massless Dirac fermions in topological Möbius strips**. Em: *International Journal of Modern Physics B* 30.31 (dez. de 2016), p. 1650224. DOI: <10.1142/s0217979216502246>. URL: <<https://doi.org/10.1142/s0217979216502246>>.
- [17] A. Einstein. **Zur Elektrodynamik bewegter Körper** [AdP 17, 891 (1905)]. Em: *Annalen der Physik* 14.S1 (fev. de 2005), pp. 194–224. DOI: <10.1002/andp.200590006>. URL: <<https://doi.org/10.1002/andp.200590006>>.
- [18] Herch Moysés Nussenzveig. **Curso de Física Básica: Ótica Relatividade Física Quântica - Vol 4**. 2010.
- [19] Tom Lancaster e Stephen J. Blundell. **Quantum Field Theory for the Gifted Amateur**. Oxford University Press, 2014. ISBN: 019969933X,9780199699339.
- [20] David J. Griffiths. **Introduction to Quantum Mechanics**. 2nd Edition. Pearson Prentice Hall, 2004. ISBN: 0131118927,9780131118928.
- [21] J. J. Sakurai. **Modern quantum mechanics**. Rev. ed. Addison-Wesley Pub. Co, 1994. ISBN: 9780201539295,0201539292. URL: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=135C77B33B4D32D809C3E39335DD6AE2>>.
- [22] Peter Collas e David Klein. **The Dirac Equation in Curved Spacetime: A Guide for Calculations**. 1ª ed. McGraw-Hill Professional.
- [23] Ashok Das. **Lectures of Quantum Field Theory**. World Scientific Publishing Company, 2008. ISBN: 9812832866,9789812832863,9812832858,9789812832856.

- [24] Walther Gerlach e Otto Stern. **Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld**. Em: *Zeitschrift für Physik* 9.1 (dez. de 1922), pp. 349–352. DOI: <10.1007/bf01326983>. URL: <<https://doi.org/10.1007/bf01326983>>.
- [25] João Barcelos Neto. **Matemática para Físicos com Aplicações**. 1ª ed. Vol. I. Livraria da Física, 2010.
- [26] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. **Solid State Physics**. Holt-Saunders, 1976.
- [27] Andrey Chaves. **Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores**. Doutorado em Física. Fortaleza: Centro de Ciências, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará, 2010.
- [28] T. Padmanabhan. **Gravitation: Foundations and Frontiers**. 1ª ed. Cambridge University Press, 2010. ISBN: 0521882230,9780521882231.
- [29] Mikio Nakahara. **Geometry, topology, and physics**. 2nd ed. Graduate student series in physics. Institute of Physics Publishing, 2003. ISBN: 0750306068,9780750306065.
- [30] R Aldrovandi e J G Pereira. **An Introduction to General Relativity**. Mar. de 2004.
- [31] Paul M. Alsing David McMahon. **Relativity Demystified - A Self-Teaching Guide**. 1ª ed. McGraw-Hill Professional, 2005.
- [32] David Toms Leonard Parker. **Quantum Field Theory in Curved Spacetime: Quantized Fields and Gravity**. 1ª ed. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 2009.
- [33] N. D. Birell e P. C. W. Davies. *Quantum Fields in Curved Space*. Cambridge University Press, 1982.
- [34] V. Fock. **Geometrisierung der Diracschen Theorie des Elektrons**. Em: *Zeitschrift für Physik* 57.3-4 (mar. de 1929), pp. 261–277. DOI: <10.1007/bf01339714>. URL: <<https://doi.org/10.1007/bf01339714>>.
- [35] E. Schrödinger. **Maxwell's and Dirac's equations in the expanding universe**. Em: *Proceedings of the Royal Irish Academy A* 46 (1940), pp. 25–47.
- [36] S. Chandrasekhar. **The solution of Dirac's equation in Kerr geometry**. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 349.1659 (jun. de 1976), pp. 571–575. DOI: <10.1098/rspa.1976.0090>. URL: <<https://doi.org/10.1098/rspa.1976.0090>>.
- [37] Leonard Parker. **One-electron atom as a probe of spacetime curvature**. Em: *Physical Review D* 22.8 (out. de 1980), pp. 1922–1934. DOI: <10.1103/physrevd.22.1922>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physrevd.22.1922>>.

- [38] Leonard Parker e Luis O. Pimentel. **Gravitational perturbation of the hydrogen spectrum**. Em: *Physical Review D* 25.12 (jun. de 1982), pp. 3180–3190. DOI: <10.1103/physrevd.25.3180>. URL: <<https://doi.org/10.1103/physrevd.25.3180>>.
- [39] J. Audretsch e G. Schäfer. **Quantum mechanics of electromagnetically bounded spin-1/2 particles in an expanding universe: I. Influence of the expansion**. Em: *General Relativity and Gravitation* 9.3 (mar. de 1978), pp. 243–255. DOI: <10.1007/bf00759377>. URL: <<https://doi.org/10.1007/bf00759377>>.
- [40] J. Audretsch e G. Schäfer. **Quantum mechanics of electromagnetically bounded spin-1/2 particles in expanding universes: II. Energy spectrum of the hydrogen atom**. Em: *General Relativity and Gravitation* 9.6 (jun. de 1978), pp. 489–500. DOI: <10.1007/bf00759543>. URL: <<https://doi.org/10.1007/bf00759543>>.
- [41] Serena Alagappan. *The Timeless Journey of the Möbius Strip*. Ed. por Scientific American. URL: <<https://www.scientificamerican.com/article/the-timeless-journey-of-the-moebius-strip/>> (acesso em 30/08/2021).
- [42] J.M. Pond. **Möbius dual-mode resonators and bandpass filters**. Em: *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* 48.12 (2000), pp. 2465–2471. DOI: <10.1109/22.898999>.
- [43] Richard L Davis. *Non-inductive electrical resistor*. U.S. Patent 3 267 406, May 1964.
- [44] Raul Perez-Enriquez. *A Structural Parameter for High Tc Superconductivity from an Octahedral Moebius Strip in RBaCuO:123 type Perovskites*. 2003. arXiv: <cond-mat/0308019> [cond-mat.supr-con].
- [45] Masataka Watanabe et al. **Electronic structure of helicoidal graphene: Massless Dirac particles on a curved surface with a screw symmetry**. Em: *Phys. Rev. B* 92 (20 nov. de 2015), p. 205425. DOI: <10.1103/PhysRevB.92.205425>. URL: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.205425>>.
- [46] V. A. Osipov e E. A. Kochetov. **Dirac fermions on graphite cones**. Em: *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* 73.10 (mai. de 2001), pp. 562–565. URL: <<https://doi.org/10.1134/1.1387528>>.
- [47] V. A. Osipov, E. A. Kochetov e M. Pudlak. **Electronic structure of carbon nanoparticles**. Em: *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 96.1 (jan. de 2003), pp. 140–149. DOI: <10.1134/1.1545393>. URL: <<https://doi.org/10.1134/1.1545393>>.
- [48] Ö. Yesiltas, J. Furtado e J. E. G. Silva. **Dirac equation on a catenoid bridge: a supersym- metric approach**. 2021. arXiv: <2107.07627> [math-ph].