



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

JOÃO JARDEL LIRA RAMOS PINTO

MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA NA FITA DE MÖBIUS

FORTALEZA

2021

JOÃO JARDEL LIRA RAMOS PINTO

MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA NA FITA DE MÖBIUS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências 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 de Almeida

Coorientador: José Euclides Gomes da Silva

FORTALEZA

2021

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)

P728m Pinto, João Jardel Lira Ramos.

Mecânica Quântica Não Relativística Na Fita De Möbius / João Jardel Lira Ramos Pinto. – 2021.
70 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.

Orientação: Prof. Dr. Carlos Alberto de Almeida.

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

1. Mecânica Quântica em Superfícies. 2. Fita de Möbius. 3. Grafeno. I. Título.

CDD 530

JOÃO JARDEL LIRA RAMOS PINTO

MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA NA FITA DE MÖBIUS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências 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: 16/09/2021

BANCA EXAMINADORA

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

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

Prof. Dr. José Ramos Gonçalves
Universidade Federal do Ceará (UFC)

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

Aos meus pais, Francisco Maurício Ramos Pinto
e Antônia Maria de Lira Pinto, por me ensinarem
a importância dos estudos e o valor do trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, pois sei que sem ele eu não chegaria até aqui, e nem muito menos terminaria esse trabalho. “Eu te louvarei, porque de um modo assombroso, e tão maravilhoso fui feito; maravilhosas são as tuas obras, e a minha alma o sabe muito bem”. Que a minha ciência louve a ti!

Aos meus pais e à meu irmão, por sempre me apoiarem com os meus estudos e por sempre estarem do meu lado.

À minha esposa Emília Silva Rocha Ramos, com quem eu amo compartilhar a vida, obrigado por seu amor e paciência, obrigado por sempre estar comigo.

Ao meu orientador Carlos Alberto, e ao meu coorientador José Euclides, pela ajuda durante a pesquisa e principalmente pela paciência. Muito obrigado por abrirem os caminhos da ciência para mim.

Ao meu irmão, amigo, e colaborador Lucas Nascimento, por sua ajuda durante toda a pesquisa, e por dividir comigo o fardo que é fazer pesquisa neste país.

Aos professores Aristeu Rosendo e José Ramos, pela presença deles na banca da minha defesa, e por suas observações sobre a minha dissertação.

À todos os professores que me ensinaram durante o meu mestrado na UFC, como também a todos os funcionários desta maravilhosa instituição.

Aos meus colegas e amigos dos meus tempos de UVA, em especial aos que “dividiram trincheira” comigo: Walter, Gabriel, Manoel, Josué, Hertan, Denisleu, Samuel e Emanuel. Tempos difíceis porém felizes!

Aos meus amigos que estiveram torcendo por mim, fico feliz por poder compartilhar a minha felicidade com vocês.

Aos professores que me ensinaram durante meu ensino fundamental e médio, muito obrigado por acreditarem em mim!

E por fim quero agradecer ao apoio financeiro por meio de pagamento de bolsa oferecido pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

“Os céus proclamam a glória de Deus, e o firmamento anuncia as obras das suas mãos.

Um dia discursa a outro dia, e uma noite revela conhecimento a outra noite.

Não há linguagem, nem há palavras, e deles não se ouve nenhum som;

No entanto, por toda terra se faz ouvir a sua voz, e as suas palavras até o aos confins do mundo.

Aí pôs uma tenda para o sol.”

(Salmo 19)

RESUMO

A descrição da dinâmica quântica de partículas restritas em superfícies tem atraído bastante a atenção dos físicos da matéria condensada nos últimos anos. Devemos isso principalmente ao fato de que pesquisas em nanoestruturas bidimensionais, tais como o grafeno, o fulereno, e os nanotubos de carbono, tem tomado grande destaque nas últimas décadas. Porém, esse assunto não é recente, há bastante tempo busca-se compreender como a curvatura afeta a mecânica quântica em superfícies bidimensionais, imersas no espaço euclidiano. As pesquisas que contemplaram esse problema seguiram duas perspectivas distintas: em uma delas a dinâmica quântica de uma partícula é abordada intrinsecamente, considerando apenas a geometria da superfície. Na outra perspectiva, examina-se o comportamento da partícula extrinsecamente, considerando tanto o método de pelo qual a partícula é restrita na superfície como a geometria do espaço no qual a partícula está imersa. Considerando essas duas abordagens, investigaremos as propriedades da mecânica quântica de uma superfície do tipo fita de Möbius. Com esse objetivo, obtemos a equação de Schrödinger para uma partícula sem spin restrita na fita de Möbius, na ausência de campos externos. Realizamos isso intrinsecamente, por meio da modificação do operador Laplaciano para um sistema curvilíneo bidimensional, definido sobre a fita de Möbius. Trabalhando extrinsecamente, utilizamos o formalismo do potencial confinante, onde além de modificar o Laplaciano da equação de Schrödinger adicionamos a ação de um potencial dependente da curvatura denominado de potencial da Costa. Devido às propriedades geométricas da fita de Möbius, não podemos realizar uma separação de variáveis na função de onda, fixamos então uma das coordenadas do sistema curvilíneo, e conseqüentemente restringimos o movimento da partícula em uma das direções possíveis. Ou a partícula se moverá em um anel em torno da fita de Möbius, ou em uma linha ao longo da largura da fita. Obtemos o Hamiltoniano hermitiano efetivo para cada direção considerada. Analisamos qualitativamente o efeito da curvatura sobre a dinâmica da partícula, tanto na abordagem intrínseca como na extrínseca, mostrando a formação de poços ou barreiras potenciais em cada caso. Analisamos intrinsecamente o movimento de partículas em torno da fita de Möbius, e extrinsecamente, para partículas que se movam apenas no centro da fita. Obtemos a função de onda normalizada e o correspondente espectro de energia para cada caso. Por fim, resumimos nossas conclusões e pontuamos nossas perspectivas futuras para este trabalho.

Palavras-chave: Mecânica Quântica em Superfícies; Fita de Möbius; Grafeno.

ABSTRACT

The description of quantum dynamics of restricted particles on surfaces has attracted considerable attention from condensed matter physicists in recent years. We owe this mainly to the fact that research on two-dimensional nanostructures, such as graphene, fullerene, and carbon nanotubes, has taken great prominence in recent decades. However, this subject is not new. There has been an attempt to understand how curvature affects quantum mechanics in two-dimensional surfaces immersed in Euclidean spaces. The research that contemplated this problem followed two distinct perspectives. In one of them, quantum dynamics of one particle is intrinsically approached, considering only the surface geometry. In the other one, the behavior of the particle is examined extrinsically, considering both the method by which the particle is restricted on the surface and the geometry of the immersion space. Considering these two approaches, we will investigate the quantum mechanical properties of a Möbius tape-like surface. With this aim, we obtain the Schrödinger equation for a spin-restricted particle in the Möbius strip in the absence of external fields. We do this intrinsically, by modifying the Laplacian operator to a two-dimensional curvilinear system, defined on the Möbius strip. Working extrinsically, we use the confining potential formalism, where, in addition to modifying the Laplacian of the Schrödinger equation, we add the action of a curvature-dependent potential called da Costa potential. Due to the geometric properties of the Möbius strip, we cannot perform a separation of variables in the wave function, so we fix one of the coordinates of the curvilinear system, and consequently restrict the particle movement in two possible directions. Either the particle will move in a ring around the Möbius strip, or in a curve across the width of the strip. We obtain effective hermitian Hamiltonians for each direction considered. We intrinsically analyze the movement of particles around the Möbius strip, and extrinsically, for particles that only move in the center of the strip. We obtain the normalized wave function and the corresponding energy spectrum for each case. Finally, we summarize our conclusions and point out our future perspectives for this work.

Keywords: Quantum Mechanics on Surfaces; Mobius Strip; Graphene.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Alótropos do carbono: No canto superior esquerdo temos o grafeno, com sua estrutura do tipo favos de mel. No outro canto superior temos o grafite, que pode ser visto como uma pilha de folhas de grafeno. No canto inferior esquerdo está representado os nanotubos de carbono, que basicamente são cilindros enrolados de grafeno. E no canto inferior direito temos o fulereno, que é formado pela adição de estruturas pentagonais na estrutura hexagonal do grafeno [1]	13
Figura 2 – O sistema de coordenadas curvilíneas (2.87) sobre uma superfície imersa no espaço euclidiano [2]	30
Figura 3 – Potencial efetivo (2.136).	39
Figura 4 – Fita de Möbius com um referencial local determinado pelos vetores tangentes \hat{e}_u , \hat{e}_θ , e o vetor normal \hat{n}	40
Figura 5 – Curvatura média da fita de Möbius de raio interno $a = 1$, com a variável u pertencente ao intervalo $-1 < u < 1$, e θ pertencente ao intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$	43
Figura 6 – Curvatura gaussiana da fita de Möbius de raio interno $a = 1$, com a variável u pertencente ao intervalo $-1 < u < 1$, e θ pertencente ao intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$	43
Figura 7 – Trajetória na fita de Möbius conectando dois lados opostos de suas bordas após uma volta completa em torno da fita [3]	48
Figura 8 – Os três primeiros autoestados para o caso do problema de Möbius-plano (gráficos à esquerda). E os três primeiros autoestados para o caso da estrutura de Möbius (gráficos à direita) [4]	51
Figura 9 – Potencial da Costa para uma fita de Möbius de raio interno $a = 1m$, para valores de u fixo (gráfico à esquerda) com $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e para valores de θ fixo (gráfico à direita), com $-4 < u < 4$	56
Figura 10 – Potencial efetivo (4.24) para determinados valores de θ no intervalo de -4 a 4	57
Figura 11 – Potencial efetivo (4.28) para determinados valores de θ no intervalo de -4 a 4	57
Figura 12 – Função de onda (4.34), para $L = 5$, com valores de n inteiro.	59
Figura 13 – Quadrado da função de onda (4.36), com $L = 5$, para valores de n inteiro.	59
Figura 14 – Potencial efetivo da equação (4.35), para $u = 0$, e raio interno parametrizado como $a = 1$	60
Figura 15 – Função de onda (4.48) para valores de m inteiros.	63

Figura 16 – Função de onda (4.48) ao quadrado para valores de m inteiros 64

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	MECÂNICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS CURVOS.	16
2.1	Princípios Básicos da Mecânica Quântica.	16
2.2	A Equação de Schrödinger.	22
2.3	Mecânica Quântica em Superfícies: Método Intrínseco e Extrínseco. . .	23
2.3.1	<i>Superfícies Imersas No \mathbb{R}^3</i>	24
2.3.2	<i>Método Intrínseco.</i>	27
2.3.3	<i>Método Extrínseco.</i>	29
2.4	Aplicação: Partícula Nas Superfícies De Uma Esfera, Cilindro, E Cone Duplo.	33
2.4.1	<i>A Esfera:</i>	33
2.4.2	<i>O Cilindro:</i>	34
2.4.3	<i>O Cone Duplo</i>	37
3	A FITA DE MÖBIUS	40
3.1	Propriedades Geométricas da Fita de Möbius.	40
3.2	Partícula Clássica na Fita de Möbius.	42
3.3	Revisão da Mecânica Quântica na Fita de Möbius	46
4	MECÂNICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA SEM SPIN NA FITA DE MÖBIUS.	52
4.1	Equação de Schrödinger na Fita de Möbius	52
4.1.1	<i>Caso Intrínseco ($\kappa = 0$):</i>	52
4.1.2	<i>Caso Extrínseco ($\kappa = 1$):</i>	55
4.2	Solução da Função de Onda Para Valores Fixos de u_0	57
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	65
	REFERÊNCIAS	67

1 INTRODUÇÃO

Desde os primórdios da mecânica quântica existe o interesse em compreender como a geometria influencia na dinâmica quântica de partículas restritas em superfícies curvas. Como pioneiro nesse assunto temos Paul Dirac que foi tratado da quantização em superfícies curvas [5]. No procedimento de Dirac a partícula é mantida em uma superfície por meio de restrições aplicadas em suas coordenadas e o sistema é então quantizado nesse espaço reduzido. A quantização é realizada então pela imposição de quantização por meio dos brakts de Dirac [6]. Essa modo de abordar o problema é denominado de abordagem intrínseca, pois nele apenas a geometria da superfície é considerada, não levando em conta assim a geometria do aonde a superfície está inserida. Seguindo ainda a metodologia adotada por Dirac, temos por exemplo os trabalhos de B. S. DeWitt (1956) e K. S. Cheng (1972), que obtiveram a equação de Schrödinger para um sistema geral, utilizando o método de integrais de caminho de Feynmann. Eles encontraram uma equação diferente da forma usual da equação de Schrödinger, pois ela dependia da curvatura total K do espaço de coordenadas [7, 8] .

Ainda na década de 70 H. Jensen e H. Koppe (1971) simularam o movimento clássico de uma partícula contida entre duas superfícies paralelas separadas por uma distância d . Utilizando a mecânica quântica no limite em que d tende a 0, Jensen e Koppe obtiveram novamente uma equação de Schrödinger que diferia da equação original por um potencial adicional dependente da curvatura da superfície [9].

Devemos também destacar o trabalho do físico brasileiro R.C.T. da Costa que na década de 80 estudou a dinâmica quântica de uma partícula restrita a se mover em uma superfície geral. Mais precisamente, da Costa considerou a equação de Schrödinger para uma partícula restrita a se mover e uma folha infinitamente fina, imersa do espaço tridimensional e sobre a ação de um potencial confinante. A função de onda é então dividida em duas partes, uma parte normal que contém o potencial confinante, e a parte tangencial, que contém um “potencial de superfície” [10]. Esse potencial é conhecido como potencial da Costa, que depende das curvaturas gaussianas e média. Por esse motivo dizemos que ele é de natureza geométrica. Este modo com que da Costa, Jensen e Koppe, trataram do problema de uma partícula quântica restrita em uma superfície se diferencia do modo de Dirac por considerar a geometria do espaço de imersão. De um modo mais claro, seguindo essa perspectiva consideramos que a partícula é mantida em uma hipersuperfície $(N - 1)$ -dimensional embebida em um espaço euclidiano N -dimensional, a partícula é restrita na superfície pela ação de um potencial confinante que toma

valores infinitamente grandes quando a partícula se move na direção normal. Essa abordagem é conhecida como formalismo do potencial confinante, ela foi desenvolvida principalmente a partir dos trabalhos de da Costa e Jensen, essa metodologia também pode ser chamada de abordagem extrínseca já que nela consideramos a geometria extrínseca da superfície.

Nos anos que se seguiram aos trabalhos de da Costa, pelo resto da década de 80 e da década de 90, a mecânica quântica em superfícies curvas foi extensivamente explorada. Estudou-se tanto os aspectos teóricos do problema como a aplicação em sistemas físicos [11, 12, 13, 14]. Esses trabalhos abordaram o problema seguindo uma dessas perspectivas diferentes, tanto intrínseca, como extrínseca.

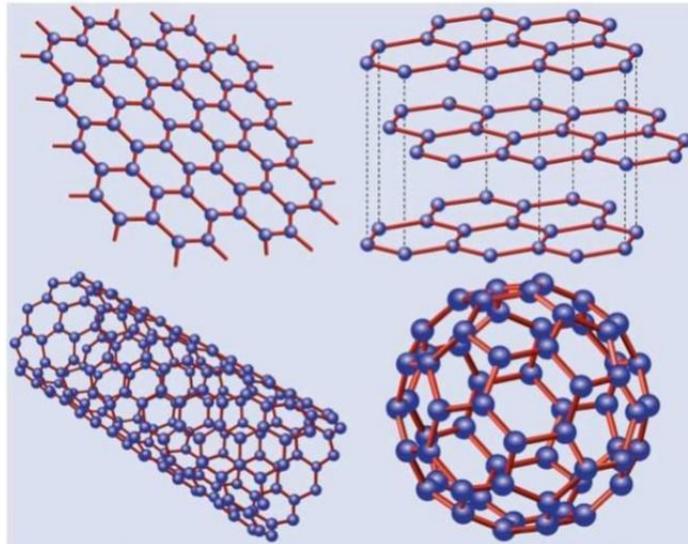


Figura 1 – Alótropos do carbono: No canto superior esquerdo temos o grafeno, com sua estrutura do tipo favos de mel. No outro canto superior temos o grafite, que pode ser visto como uma pilha de folhas de grafeno. No canto inferior esquerdo está representado os nanotubos de carbono, que basicamente são cilindros enrolados de grafeno. E no canto inferior direito temos o fullereno, que é formado pela adição de estruturas pentagonais na estrutura hexagonal do grafeno [1]

As pesquisas desenvolvidas nos trabalhos citados acima tornaram-se muito úteis para a física da matéria condensada nos últimos anos. Os cenários bidimensionais desenvolvidos naqueles trabalhos encontraram aplicações reais com o desenvolvimento da física de baixa dimensionalidade, dando-se destaque ao formalismo do potencial confinante. Isso deve-se principalmente a importância adquirida por pesquisas relacionadas aos alótropos do carbono, tais como os fullerenos, nanotubos, e o grafeno. O grafeno é um alótropo do carbono que vem sendo estudado extensivamente nas últimas décadas. Ele foi isolado em laboratório pela primeira vez em 2004 [15], o que rendeu um premio nobel em 2010 aos seus descobridores, e desde então ele vem despertando o interesse da comunidade científica. No grafeno, átomos de carbono

estão dispostos em uma estrutura hexagonal, de forma semelhante aos favos de mel (Figura 1) [1], suas notáveis propriedades vêm dessa forma especial com que seu átomos estão arranados. Por exemplo, uma folha de grafeno não possui nenhuma lacuna na banda de condutância, e assim um elétron em sua superfície se comporta como um férmion sem massa, por outro lado uma bicamada de grafeno possui uma relação de dispersão quadrática, que fornece um gap na banda de condutância. Tal gap permite interessantes aplicações na eletrônica [16]. Encontramos alótropos de carbono na natureza, como é o caso do grafite e do diamante, porém também é possível sintetizar outros alótropos de carbono em laboratório. Antes mesmo do grafeno o fulereno e os nanotubos de carbono já eram alvo de pesquisas. As propriedades físicas do grafeno são realmente surpreendentes, dentre elas podemos destacar a sua baixa dimensionalidade, seu espectro de Dirac, e sua natureza do tipo membrana [17].

O grafeno possui propriedades que o tornam semelhante a sistemas estudados na física de altas energias. Por exemplo, a interação entre os elétrons e a rede de átomos de carbono do grafeno faz com que eles pareçam não ter massa, sendo semelhantes a férmions de Dirac [18]. Partículas desse tipo são estudadas pela mecânica quântica relativística sendo governadas pela equação de Dirac. As propriedades e fenômenos observados no grafeno estão intimamente relacionados com a sua geometria, por exemplo, a curvatura de nanocones de grafite produzem fases topológicas [19], faixas helicoidais possuem propriedades quirais [20], e campos pseudomagnéticos são gerados por flutuações na curvatura [21]. Além do grafeno outras nanoestruturas bidimensionais baseadas em átomos de carbono tem atraído a atenção da comunidade científica. Estruturas tais como os nanotubos de carbono [22], e o fosforeno [23]. Outras nanoestruturas de grafeno que também tem proporcionado pesquisas promissoras na área da física da matéria condensada, são os nanoânéis e nanofitas de grafeno [24, 25].

Como podemos ver, o grafeno constitui um sistema bidimensional imerso em um espaço tridimensional, e que pode também ser dotado de curvatura. Esse é justamente o tipo de sistema que foi explorado na mecânica quântica em espaços curvos desenvolvida no final do século XX. Atualmente muitos pesquisadores tem trabalhado com o formalismo do potencial confinante na investigação das propriedades físicas de estruturas bidimensionais feitas de grafeno. Essas estruturas são dotadas de diversos tipos de geometria, até mesmo geometrias não triviais. Um bom exemplo disso é o caso da fita de Möbius. Há bastante tempo a fita de Möbius tem chamado a atenção dos físicos devido suas propriedades geométricas não usuais, e muitas pesquisas foram motivadas pela possibilidade de se construir um dispositivo de grafeno com

essa geometria. Como exemplo, temos o trabalho pioneiro de Yakubo, Avishai e Cohen, que investigaram as propriedades de correntes persistentes em anéis quânticos com geometria do tipo fita de Möbius [26]. Zehao Li e Ram Mohan [27], e também Gravesen e Willatzen [4], estudaram os a equação de Schrödinger na fita de Möbius. Seguindo ainda um nível não relativístico, temos também os trabalhos de Miliordos que calculou as funções de onda para uma partícula restrita na borda de uma fita de Möbius. Ele obteve que no caso de uma faixa estreita o momento angular orbital da partícula assume valores inteiros e meio-inteiros de \hbar [28]. Miliordos usou esse modelo também para explicar o conceito químico de aromaticidade na fita de Möbius [29]. Também temos trabalhos no nível relativístico, o que envolve o uso da equação de Dirac, como por exemplo no estudo do acoplamento de férmions relativísticas na fita de Möbius [30]. Temos ainda vários outros trabalhos que consideraram as propriedades físicas de dispositivos dotados de um geometria do tipo fita de Möbius [31, 32, 33, 34, 35, 36]. Além da possibilidade de construir uma fita de Möbius em grafeno, observou-se que existem estruturas na natureza que exibem uma geometria do tipo da fita de Möbius, como é o caso dos cristais de nióbio e selênio ($NbSe_3$) [37].

Diante de tudo isso, torna-se evidente a necessidade de se estudar a mecânica quântica de superfícies bidimensionais. O presente trabalho tem como objetivo investigar a dinâmica quântica de uma partícula, em um nível não relativístico, em uma superfície bidimensional. Escolhemos voltar nossa atenção para a superfície da fita de Möbius, tanto por suas valiosas propriedades que já vem sendo estudadas há bastante tempo, como pelo interesse teórico em se estudar a mecânica quântica em uma superfície não orientável.

Dividimos esse trabalho da seguinte forma: No capítulo 2, realizamos uma breve introdução à mecânica quântica, e abordamos o método intrínseco e extrínseco da mecânica quântica em superfícies curvas. No capítulo 3 discorremos sobre as propriedades geométricas da fita de Möbius, examinamos o movimento clássico de uma partícula nessa superfície, e pontuamos alguns resultados disponíveis na literatura sobre a mecânica quântica na fita de Möbius. No capítulo 4 investigamos a mecânica quântica de uma partícula sem spin, em um nível não relativístico, restrita na fita de Möbius. Obtemos a equação de Schrödinger, e o correspondente potencial efetivo, de uma partícula que se move em torno da fita de Möbius, ou que se mova ao longo da largura da fita. E por fim examinamos de forma qualitativa a influência da curvatura na dinâmica da partícula. No capítulo 5 resumimos os resultados atuais da pesquisa, e pontuamos nossas perspectivas futuras para esse trabalho.

2 MECÂNICA QUÂNTICA EM ESPAÇOS CURVOS.

Iniciaremos nosso trabalho discorrendo brevemente sobre a mecânica quântica de uma partícula em um nível não relativístico. Nesse capítulo, introduziremos o leitor aos princípios básicos da teoria quântica, com o objetivo de chegar na principal equação que nos ocuparemos no decorrer da dissertação: A equação de Schrödinger. Posteriormente, realizaremos a transição da mecânica quântica no espaço tridimensional plano para o espaço bidimensional curvo.

2.1 Princípios Básicos da Mecânica Quântica.

Conceito de estado na mecânica quântica: O conceito de trajetória da mecânica clássica deve ser substituído pelo conceito de estado variável no tempo [38]. Toda a informação do estado quântico de qualquer partícula, como por exemplo o elétron, será determinado pela função de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$. A função sozinha não possui significado físico, porém o seu módulo ao quadrado possui uma interpretação física importantíssima, a partir dele podemos calcular a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula em uma região do espaço. Seja então $d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t)$ a probabilidade de uma partícula se encontrar em um instante t e em um elemento de volume $d^3r = dx dy dz$, contido no ponto \mathbf{r} , usando o modulo ao quadrado da função de onda temos que,

$$d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = C |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r, \quad (2.1)$$

aonde C é uma constante de normalização. Para que possamos ter uma mecânica quântica consistente a função de onda deve se normalizada, isso significa dizer que não existe perda, ou ganho na densidade de probabilidade de se encontrar uma partícula em um determinado estado. Conseqüentemente, a probabilidade deve ser uma grandeza conservada. A constante de normalização é determinada a partir de

$$C \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (2.2)$$

Em mecânica quântica, um estado físico é representado por um vetor de estado em um espaço vetorial complexo de dimensão infinita, tal espaço é chamado de espaço de Hilbert \mathcal{H} [39]. Portanto, o estado quântico de um sistema em um certo instante de tempo é caracterizado por um vetor pertencente ao espaço vetorial \mathcal{H} , na notação de Dirac esse vetor é chamado de **ket**, e é denotado por $|\psi(t_0)\rangle$. Na notação de Dirac, grandezas físicas tais como momento angular, energia ou momento são representados por operadores lineares no espaço vetorial de Hilbert,

esses operadores são denominados de **observáveis**. Em mecânica quântica existem kets especiais chamados de autokets, ou **autovetores** de um operador A . A propriedade desses kets é que:

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (2.3)$$

aonde a' é simplesmente um número, denominado de **autovalor** do operador A , e o conjunto de autovalores de um operador é chamado de **espectro** do operador. Um estado quântico representado por um autovetor é denominado de autoestado. Associado ao espaço vetorial dos kets, existe um espaço vetorial “dual” denominado de espaço dos **bras**. Então, para cada ket $|\alpha\rangle$, existe um bra associado denotado por $\langle\alpha|$. Definimos o produto interno entre um bra e um ket como:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle) \quad (2.4)$$

aonde postulamos que $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$. Seja X um operador, o dual do ket $X|\alpha\rangle$ será o bra $\langle\alpha|X^\dagger$, aonde X^\dagger é o adjunto hermitiano do operador X . Um operador será chamado de hermitiano se:

$$X = X^\dagger. \quad (2.5)$$

Continuemos então a examinar a mecânica quântica do ponto de vista de seus postulados [38]. Consideramos sistemas de espectro discreto, representados por kets no espaço de Hilbert:

Postulado 1: Em um instante t_0 , toda a informação física de um sistema está contida em um ket $|\psi(t_0)\rangle$, pertencente ao estado de Hilbert.

Postulado 2: Qualquer quantidade física acessível experimentalmente \mathcal{A} , é representada por um operador A denominado de observável.

Postulado 3: O único resultado possível da medida de uma quantidade física \mathcal{A} , será um dos autovalores do observável A .

Postulado 4 :

a. espectro discreto não degenerado: Quando medimos uma quantidade física \mathcal{A} em um sistema que está no estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade de obtermos um valor não degenerado autovalor a_n , do correspondente observável A é:

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2, \quad (2.6)$$

aonde $|u_n\rangle$ é o autovetor normalizado de A , com autovalor a_n .

b. espectro discreto degenerado: Quando medimos uma quantidade física \mathcal{A} em um sistema que está no estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade de obtermos um autovalor a_n , do correspondente observável A é:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2, \quad (2.7)$$

aonde g_n é o grau de degenerância de a_n e $\{|u_n^i\rangle\}$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$) é um conjunto ortogonal de vetores que formam uma base.

Postulado 5: Quando medimos uma quantidade física \mathcal{A} em um sistema que se encontra em um estado $|\psi\rangle$ obtemos como resultado o autovalor a_n , então o estado do sistema após a medida é a projeção normalizada de $|\psi\rangle$ no autoespaço associado com a_n :

$$|\psi\rangle \implies \frac{\mathbf{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \mathbf{P}_n | \psi \rangle}}, \quad (2.8)$$

aonde $\mathbf{P}_n = \langle a_n | a_n \rangle$ é o operador projeção.

Postulado 6: A evolução de um estado $|\psi\rangle$ é governado pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.9)$$

aonde $H(t)$ é o observável associado com a energia total do sistema. O operador H é denominado como o operador Hamiltoniano do sistema. Estamos agora então em condições de descrever a quantização de sistemas físicos por meio da *quantização canônica*.

Regras da Quantização Canônica : A quantização de um sistema físico é obtida associando as coordenadas do sistema a um operador $\mathbf{x}(x, y, z)$, e associando os momentos das correspondentes coordenadas a um operador $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$. Impomos então regras de comutação sobre \mathbf{x} e \mathbf{p} :

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad (2.10)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}.$$

Na mecânica clássica, o estado de um sistema pode ser caracterizado por meio de suas coordenadas e dos momentos associados com essas coordenadas. Sendo assim, qualquer grandeza física do sistema pode ser dada em função dessas coordenadas. Portanto, as regras de quantização canônica, providenciam um procedimento simples para obtermos uma representação quântica

de uma grandeza classicamente definida. Seguindo esse procedimento, um observável A , que descreve uma quantidade física \mathcal{A} , é obtido substituindo as coordenadas e momentos em \mathcal{A} pelos operadores \mathbf{x} e \mathbf{p} , respectivamente.

As relações presentes na equação (2.10) contemplam somente a mecânica quântica desenvolvida no espaço plano. Se desejamos trabalhar em espaços com curvatura devemos tomar novas regras de quantização canônicas. Por exemplo, consideremos uma partícula não relativística restrita em uma superfície definida por [6]

$$f(\mathbf{x}) = 0, \quad (2.11)$$

onde $\mathbf{x} = (x, y, z)$. A condição necessária para que a partícula permaneça somente sobre a superfície durante seu movimento é que

$$\frac{df}{dt} = \dot{x} \cdot \nabla f(\mathbf{x}) = 0. \quad (2.12)$$

Ou seja, não existe movimento na direção normal à superfície. Devemos também. A restrição expressa na equação (2.11) é chamada de restrição de primeira classe, enquanto que a restrição (2.12) é chamada de restrição de segunda classe. Acontece que não existe garantias que as relações (2.10) sejam satisfeitas no espaço curvo. Dirac propôs o seguinte modo de resolver esse problema [6]. Consideremos que existam um certo numero de condições primárias e secundárias representadas por:

$$X_r(q, p) = 0, \quad (2.13)$$

como por exemplo $x_1 = f(\mathbf{x})$ e $x_2 = \mathbf{p} \cdot \nabla f(\mathbf{x})$, onde $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}}$. Esses dois casos podem ser distinguidos por meio dos elementos de matriz

$$C_{rs} \equiv [X_r(q, p), X_s(q, p)]_P. \quad (2.14)$$

Estamos utilizando os parênteses de Poisson, que para dois operadores $f(q, p)$ e $g(q, p)$ é:

$$[f(q, p), g(q, p)] \equiv \sum_N \left[\frac{\partial f(q, p)}{\partial q_N} \frac{\partial g(q, p)}{\partial p_N} - \frac{\partial g(q, p)}{\partial q_N} \frac{\partial f(q, p)}{\partial p_N} \right]. \quad (2.15)$$

Restrições aonde temos que para uma determinada coordenada u_S , $\sum_S C_{rS} u_S = 0$, para qualquer valor de r são restrições de primeira classe, e devemos lidar com elas restringindo o número de variáveis independentes. As restrições de segunda classe são definidas por meio de:

$$\text{Det } C \neq 0, \quad (2.16)$$

de modo que C possua uma inversa C^{-1} . Dirac propôs então que em uma teoria que possua apenas vínculos de segunda classe o comutador de dois operadores seja dado agora por:

$$[f(q, p), g(q, p)] = i\hbar [f(q, p), g(q, p)]_D \quad (2.17)$$

onde $[f(q, p), g(q, p)]_D$ é o parêntese de Dirac:

$$[f(q, p), g(q, p)]_D \equiv [f(q, p), g(q, p)]_P - \sum_{rs} [f(q, p), X_r(q, p)]_P C_{rs}^{-1}(q, p) [X_s(q, p), g(q, p)]_P \quad (2.18)$$

As relações canônicas são substituídas agora por

$$[q_N, p_M] = i\hbar \left[\delta_{NM} - \sum_{rs} \frac{\partial X_r}{\partial p_N} C_{rs}^{-1} \frac{\partial X_s}{\partial q_N} \right] \quad (2.19)$$

e

$$\begin{cases} [q_N, q_M] = i\hbar \sum_{rs} \frac{\partial X_r}{\partial p_N} C_{rs}^{-1} \frac{\partial X_s}{\partial p_M}, \\ [p_N, p_M] = i\hbar \sum_{rs} \frac{\partial X_r}{\partial q_N} C_{rs}^{-1} \frac{\partial X_s}{\partial q_M} \end{cases} \quad (2.20)$$

A proposta de Dirac satisfaz uma série de condições necessárias para os comutadores e satisfaz também as restrições (2.13) [6].

Representações de $|x'\rangle$ e $|p'\rangle$: Enunciamos os postulados acima tratando apenas de observáveis com espectro discreto. Contudo, na mecânica quântica, existem observáveis com espectros contínuos [39]. Este é caso dos operadores posição e momento que usamos ao definir as regras de comutação canônica. Os kets $|x'\rangle$ e $|p'\rangle$ são autovetores de \mathbf{x} e \mathbf{p} , respectivamente, cada um deles formam um subespaço vetorial no espaço de Hilbert. Vamos considerar que o subespaço criados por esses kets tenham apenas uma dimensão. Podemos então expandir um estado quântico em um desses subespaços, como por exemplo, se expandirmos o estado $|\alpha\rangle$ em termos de $|x'\rangle$, teremos que

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle. \quad (2.21)$$

Vemos que $\langle x'|\alpha\rangle$ é o coeficiente dessa expansão, e podemos interpretá-lo de tal forma que $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx'$ represente a probabilidade de se encontrar uma partícula em um intervalo entre x' e $x' + dx'$. Nos referiremos então ao produto $\langle x'|\alpha\rangle$ como sendo a função de onda $\psi_\alpha(x')$ para o estado $|\alpha\rangle$. Escrevemos então que,

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle. \quad (2.22)$$

A mesma função de onda pode se ainda expandida em termos dos autoestados $|a'\rangle$ de um operador A :

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x'), \quad (2.23)$$

aonde $u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle$ é a autofunção do operador A com autovalor a' . O valor esperado de um operador A , no espaço de posição, será dado por

$$\langle \beta|A|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') A \psi_\alpha(x'). \quad (2.24)$$

Um resultado que nos será útil é a forma do operador momento na base de ξ , partido-se da definição de momento como gerador de translação, obtemos que,

$$\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \right) \quad (2.25)$$

A partir desse resultado obtemos uma identidade bastante importante [39]:

$$\langle \beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi_\alpha(x'). \quad (2.26)$$

Podemos então escrever que,

$$\mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}. \quad (2.27)$$

Podemos realizar a expansão de um estado no espaço dos momentos também, chamamos ela de função de onda no espaço do momento:

$$\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle. \quad (2.28)$$

A conexão entre as duas representações é obtida por meio de [39]

$$\psi_\alpha(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p'), \quad (2.29)$$

e

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(x'), \quad (2.30)$$

.

Princípio de incerteza de Heisenberg: As relações de comutação dadas pelas equações (2.10) implicam que \mathbf{x} e $\mathbf{p}_\mathbf{x}$ são observáveis incompatíveis. Isso significa que esses dois operadores não possuem um conjunto completo de autoestados simultâneos, consequentemente

não é possível medi-los ao mesmo tempo. Temos então de levar em consideração a *incerteza* inerente ao processo de medição, sejam por exemplo \mathbf{A} e \mathbf{B} dois observáveis, então $(\Delta\mathbf{A})^2$ e $(\Delta\mathbf{B})^2$ serão as dispersões de A e B , respectivamente. Sendo assim, para qualquer estado, vale a seguinte desigualdade [39]:

$$\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2 \quad (2.31)$$

Usando (2.10) em (2.31), obtemos a relação de incerteza posição-momento de Heisenberg:

$$\langle(\Delta\mathbf{x})^2\rangle\langle(\Delta\mathbf{p}_\mathbf{x})^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.32)$$

2.2 A Equação de Schrödinger.

Na seção anterior falamos que a evolução temporal de um ket de estado era dado pela equação de Schrödinger, conforme está na equação (2.9). Nosso objetivo agora será determinar a evolução temporal da função de onda $\psi(\mathbf{x}', t) = \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle$, aqui $|\alpha, t_0; t\rangle$ é um ket de estado na representação de Schrödinger no instante t , e $\langle x' |$ é um bra do espaço de posição, independente do tempo, com autovalor x' . Tomemos o Hamiltoniano como sendo

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x). \quad (2.33)$$

aonde $V(x)$ é um potencial que depende somente de x . Obteremos agora a equação de Schrödinger dependente do tempo. Partindo da equação (2.9), escrevemos que $|\psi\rangle = |\alpha, t_0; t\rangle$ e multiplicamos ambos os lados por $\langle x' |$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle x' | H | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.34)$$

note que estamos usando o fato que $\langle x' |$ não varia com o tempo na representação de Schrödinger. Usando a equação (2.17) podemos calcular a contribuição do primeiro termo de (2.33), ao substituírmos o hamiltoniano na equação de Schrödinger:

$$\langle x' | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \alpha, t_0; t \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla'^2 \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle. \quad (2.35)$$

No caso do potencial, temos simplesmente que,

$$\langle x' | V(\mathbf{x}) = \langle x' | V(x'). \quad (2.36)$$

Juntando tudo, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle. \quad (2.37)$$

A equação (2.37) é conhecida como a equação de Schrödinger dependente do tempo, usualmente nos a escrevemos como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t). \quad (2.38)$$

A dependência temporal de um autoestado é dada pelo termo [39],

$$\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right), \quad (2.39)$$

aonde $E_{a'}$ é o autovalor da energia. Isso nos permite escrever agora a função de onda em um instante t como

$$\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right), \quad (2.40)$$

aqui estamos entendendo que o estado foi inicialmente preparado em um autoestado simultâneo de A e H , com autovalores a e $E_{a'}$, respectivamente. Vamos agora substituir (2.40) na equação (2.37), fazendo isso obtemos que

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle = E_{a'} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \quad (2.41)$$

E finalmente podemos escrever essa equação como:

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \phi_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}') \phi_E(\mathbf{x}') = E \phi_E(\mathbf{x}'), \quad (2.42)$$

essa equação é chamada de equação de Schrödinger independente do tempo.

2.3 Mecânica Quântica em Superfícies: Método Intrínseco e Extrínseco.

Como foi dito na introdução, a mecânica quântica em superfícies curvas imersas no espaço euclidiano tridimensional é analisada seguindo duas abordagens diferentes. Uma abordagem examina o problema intrinsecamente, levando em conta somente a geometria da superfície, e a outra examina o problema extrinsecamente, considerando tanto a geometria da superfície como o espaço onde a superfície esta imersa. Sendo mais detalhista, na abordagem intrínseca consideramos que a partícula está restrita na superfície *a priori*, o Hamiltoniano é então escrito somente em termos das coordenadas do sistema, e dos momentos correspondentes,

e então quantizamos o sistema canonicamente [13]. Já na abordagem extrínseca, a partícula é restrita na superfície por uma força muito intensa que age no sentido normal à superfície (potencial confinante). Obtemos assim uma partícula em um estado confinado sobre a superfície, o Hamiltoniano efetivo resultante terá um termo a mais, que dependerá tanto da curvatura intrínseca do curvatura extrínseca da superfície. Passaremos a mostrar agora, seguindo essas duas abordagens, como a curvatura e o método de confinamento modifica a mecânica quântica de uma partícula. Mas primeiro revisaremos conceitos fundamentais da geometria diferencial de superfícies imersas no espaço tridimensional euclidiano.

2.3.1 Superfícies Imersas No \mathbb{R}^3

Consideremos uma superfície imersa no espaço tridimensional parametrizada como [40]:

$$\mathbf{r} := \mathbf{r}(u^1, u^2) = (x(u^1, u^2), y(u^1, u^2), z(u^1, u^2)) \quad (2.43)$$

onde os parâmetros $\{u^1, u^2\}$ formam um conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^2$. Seja então a matriz Jacobiana dada por: $\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(u^1, u^2)}$ uma matriz rank 2, isso implica que os vetores dados por:

$$\mathbf{e}_a = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u^a} = \partial_a \mathbf{r}, \quad a \in \{1, 2\}, \quad (2.44)$$

sejam linearmente independentes. Os vetores definidos em (2.44) são os vetores tangentes à superfície definida em (2.33). Juntamente com o vetor unitário normal à essa superfície

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2}{|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2|}. \quad (2.45)$$

Os vetores \mathbf{e}_a formam um sistema de referências local já que

$$\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1. \quad (2.46)$$

A partir dos vetores tangentes \mathbf{e}_a podemos definir o tensor métrico para essa superfície do seguinte modo:

$$g_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b, \quad (2.47)$$

sendo então um tensor de segunda ordem simétrico ($g_{ab} = g_{ba}$) e positivamente definido. O elemento infinitesimal de distância ds é obtido por meio de:

$$ds^2 = (\mathbf{e}_1 du^1 + \mathbf{e}_2 du^2)^2 = (\mathbf{e}_a du^a)^2 = (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b du^a du^b), \quad (2.48)$$

ou seja,

$$ds^2 = g_{ab} du^a du^b. \quad (2.49)$$

Definimos $g = \det(\mathbf{g})$ como sendo o determinante do tensor métrico. O quadrado do elemento infinitesimal dado por (2.49) também é conhecido para superfícies no espaço euclidiano como primeira forma fundamental. Definimos a primeira forma fundamental para um sistema de coordenadas (u, v) de uma superfície contida no espaço euclidiano como [41]:

$$I = ds \cdot ds = Edu^2 + 2Fdudv + Gdv^2 \quad (2.50)$$

onde os coeficientes da E, F e G são dados por:

$$E = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u, \quad F = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_v, \quad G = \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{e}_v. \quad (2.51)$$

O elemento infinitesimal de área dA é calculado da seguinte forma:

$$dA = |\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2| du^1 du^2. \quad (2.52)$$

Mas, sendo α o ângulo entre os vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 , temos que

$$\begin{aligned} |\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2| &= |\mathbf{e}_1| |\mathbf{e}_2| \text{Sen} \alpha = g_{11} g_{22} (1 - \text{Cos}^2 \alpha) \\ &= g_{11} g_{22} - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \\ &= g_{11} g_{22} - g_{12} g_{12} = g. \end{aligned}$$

Portanto,

$$dA = \sqrt{g} du^1 du^2. \quad (2.53)$$

O operador diferencial ∇_i também necessita de ser generalizado do espaço plano para um espaço bidimensional curvo. Essa generalização é realizada por meio da derivada covariante, definida como [42]

$$\nabla_i V^j = \partial_i V^j + \Gamma_{ik}^j V^k \quad (2.54)$$

onde Γ_{ik}^j são os símbolos de Christoffel que dependem exclusivamente da métrica e de suas derivadas. Os símbolos de Christoffel nos serão úteis quando definirmos a derivação em espaços

curvos, por meio da *derivada covariante*. Para um sistema curvilíneo de coordenadas, eles são dados por [42]:

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2}g^{mi}(g_{km,j} + g_{mj,k} - g_{jk,m}) \quad (2.55)$$

Para introduzir o conceito de curvatura devemos primeiro definir a segunda forma diferencial, que para uma superfície parametrizada por um sistema de coordenadas (u, v) , é definida como [41]:

$$II = -ds \cdot \mathbf{n} = edu^2 + 2fdudv + dv^2 + gdv^2, \quad (2.56)$$

onde os coeficientes e , f e g são dados por:

$$e = \partial_u \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{n}, \quad f = \partial_u \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n}, \quad g = \partial_v \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n}. \quad (2.57)$$

Os coeficientes da primeira e segunda formas diferenciais são importantes pois a partir deles podemos calcular as derivadas do vetor normal \mathbf{n} em relação as coordenadas da superfície. Seja então \mathbf{n}_i a derivada primeira do vetor normal em relação a $i = (u, v)$, segundo as equações de Weingarten, temos que [40]

$$\begin{cases} N_u = \frac{fF - eG}{EG - F^2} \mathbf{e}_u + \frac{eF - fE}{EG - F^2} \mathbf{e}_v, \\ N_v = \frac{gF - fG}{EG - F^2} \mathbf{e}_u + \frac{fF - gE}{EG - F^2} \mathbf{e}_v. \end{cases} \quad (2.58)$$

Se a superfície for regular e se \mathbf{e}_u e \mathbf{e}_v forem linearmente independentes, podemos escrever as equações de Weingarten como

$$\begin{cases} N_u = a_{11} \mathbf{e}_u + a_{12} \mathbf{e}_v, \\ N_v = a_{12} \mathbf{e}_u + a_{22} \mathbf{e}_v. \end{cases} \quad (2.59)$$

onde os coeficientes a_{ij} são dados por [40]:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{EG - F^2} \begin{pmatrix} Ff - Ge & Fg - Gf \\ Fe - Ef & Eg - Ff \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

Podemos agora definir a curvatura gaussiana K , e a curvatura média M , como [40] :

$$K = \det(a_{ij}) = \frac{eg - f^2}{EG - F^2}, \quad (2.61)$$

e

$$M = \frac{1}{2} \text{Tr}(a_{ij}) = \frac{eG - 2fF + gE}{2(EG - F^2)}. \quad (2.62)$$

A curvatura gaussiana proporciona uma medida intrínseca da curvatura, ou seja, observadores que vivessem na superfície poderiam medir essa curvatura a partir das propriedades geométricas da superfície. Já a curvatura média é uma medida extrínseca da curvatura fazendo sentido somente quando a superfície está imersa em um espaço de dimensão superior.

2.3.2 Método Intrínseco.

Em mecânica clássica, o estado de uma partícula é caracterizado por suas coordenadas generalizadas q_i 's ($i = 1, 2, 3, \dots, N$), e pelos seus momentos generalizados correspondente p_i 's. O par (q_i, p_i) gera um espaço fictício, de dimensão $2N$ denominado espaço de fases, o movimento do sistema no espaço de fases é representado por curvas que contém todos os q_i 's p_i 's possíveis ao sistema. A evolução temporal do sistema será regida pelo seu Hamiltoniano clássico, dado por

$$H(p_i, q_i) = \sum_i \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i), \quad (2.63)$$

onde \mathcal{L} é o lagrangiano do sistema. Em um sistema clássico, de momento \mathbf{p} e massa m , o Hamiltoniano será dado por

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x), \quad (2.64)$$

onde $V(x)$ é um potencial que depende somente das coordenadas do sistema. Se considerarmos que a partícula está restrita a uma superfície curva, devemos levar em consideração as propriedades geométricas desse espaço. Consideremos então uma partícula de massa m restrita a se mover em uma superfície curva Σ , imersa no espaço euclidiano. As coordenadas da partícula no espaço euclidiano são dadas por $x_m = \{x_1, x_2, x_3\} = \{x, y, z\}$. O vetor posição da partícula em coordenadas cartesianas será dado por

$$\mathbf{r}(x, y, z) = x_1 \mathbf{i} + x_2 \mathbf{j} + x_3 \mathbf{k}. \quad (2.65)$$

O movimento de uma partícula restrita em uma superfície é caracterizada por duas coordenadas generalizadas: (q^1, q^2) , que definem uma parametrização para a superfície. Consideremos agora uma transformação de coordenadas que admite inversa [40]:

$$x_m = x_m(q^1, q^2); \quad m = 1, 2, 3. \quad (2.66)$$

$$q^i = q^i(x_1, x_2, x_3); \quad i = 1, 2. \quad (2.67)$$

O movimento da partícula será caracterizado pelas coordenadas q^i , essas coordenadas estão definidas paralelamente à superfície considerada. Portanto, não existe movimento na direção normal. O vetor deslocamento, $d\mathbf{r}$, no novo sistema de coordenadas fica,

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i} dq^i = \mathbf{e}_i dq^i, \quad (2.68)$$

aqui estamos usando a convenção de Einstein segundo a qual índices repetidos indicam uma soma, ou seja:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i} dq^i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^1} dq^1 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^2} dq^2. \quad (2.69)$$

Estamos definindo \mathbf{e}^i como base dos vetores covariantes (2.44). O elemento infinitesimal é então dado por (2.49). O vetor momento \mathbf{p} possui componentes covariantes dadas por $\mathbf{p} = p_i \mathbf{e}^i$, onde $\mathbf{e}^i = g^{ij} \mathbf{e}_j$. Temos então que o produto $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$ é igual a $\mathbf{p}^2 = \mathbf{p}_i \mathbf{e}^i \mathbf{p}_j \mathbf{e}^j = g^{ij} p_i p_j$. O Hamiltoniano de uma partícula restrita nesse espaço, na ausência de qualquer campo externo, será dado por

$$H = \frac{1}{2m} g^{ij} p_i p_j. \quad (2.70)$$

A quantização de um sistema físico regido pelo Hamiltoniano (2.62) é obtida substituindo p_i pelo operador $\mathbf{p}_i = -i\hbar \nabla_i$, sendo ∇_i a derivada covariante dessa superfície.

No nosso sistema de referência o operador momento é dado por $\mathbf{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^i}$, mas observe também que o operador ∇ nesse sistema de referência será dado por [42]:

$$\nabla = \mathbf{e}^i \otimes \nabla_i. \quad (2.71)$$

Portanto nosso hamiltoniano se torna igual a:

$$H = \frac{-\hbar}{2m} g^{ij} \nabla_i \nabla_j \quad (2.72)$$

O operador diferencial ∇^2 é o operador Laplaciano, em coordenadas curvilíneas, o Laplaciano de uma função escalar ϕ é dado por [42]

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^k} \left(\sqrt{g} g^{kj} \frac{\partial \phi}{\partial q^j} \right). \quad (2.73)$$

Consequentemente a equação de Schrödinger dependente do tempo (2.38) deve ser modificada, tornando-se igual a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{q}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}^k} \left(\sqrt{g} g^{kj} \frac{\partial \psi(\mathbf{q}', t)}{\partial \mathbf{q}^j} \right), \quad (2.74)$$

onde consideramos a ausência de qualquer campo externo.

2.3.3 Método Extrínseco.

Na abordagem extrínseca, a partícula se encontra no espaço euclidiano tridimensional, mas é obrigada a se mover somente sobre uma superfície pela ação de um potencial confinante. Essa abordagem se aproxima mais da realidade do que a abordagem intrínseca, pois sabemos que nos problemas reais estamos lidando com partículas localizadas em superfícies que estão contidas no espaço euclidiano. Diferente da abordagem vista na seção anterior a quantização ocorre de modo convencional no espaço euclidiano. Porém, a função de onda é "imprimida" na superfície pela ação do potencial confinante, reduzindo-a para um estado bidimensional. Como resultado surge um potencial de origem geométrica, que depende tanto da curvatura intrínseca como da curvatura extrínseca da superfície. Importantes contribuições para o estabelecimento dessa abordagem foram feitas da Costa [10, 43] e por Jensen [9]. Atualmente essa abordagem é mais conhecida como formalismo do potencial confinante. Gostaríamos de desenvolver essa metodologia aqui de uma forma próxima ao modo que da Costa a apresentou em seus trabalhos, para isso consideremos uma superfície S no espaço euclidiano parametrizada pela equação $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2)$, aonde \vec{r} é o vetor posição de um ponto arbitrário P sobre a superfície. O espaço tridimensional imediatamente próximo a superfície pode ser parametrizado por [10]

$$\mathbf{R}(u_1, u_2, u_3) = \mathbf{r}(u_1, u_2) + u_3 \hat{\mathbf{N}}(u^1, u^2), \quad (2.75)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor normal em P . O valor tomado por u^3 é a distância entre o ponto P da superfície, e o ponto Q de coordenadas (u_1, u_2, u_3) . As componentes covariantes do tensor métrico na superfície S são dadas por

$$g_{ij} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_j}, \quad \text{com } i, j = 1, 2. \quad (2.76)$$

Considerando que as derivadas da normal $\hat{\mathbf{n}}$ permaneçam no espaço tangente, temos que

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial u_i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_j}, \quad (2.77)$$

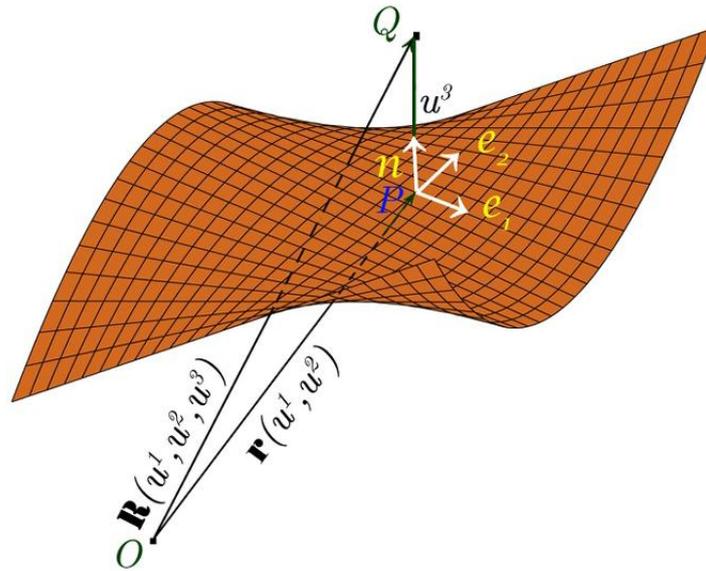


Figura 2 – O sistema de coordenadas curvilíneas (2.87) sobre uma superfície imersa no espaço euclidiano [2]

onde os α_{ij} são as componentes das equações de Weingarten (2.58). A partir de (2.77) e (2.79), podemos obter que,

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial u_i} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + \alpha_{ij} u_3) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_i}, i, j = 1, 2 \quad (2.78)$$

e

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial u^3} = \hat{\mathbf{N}}(u_1, u_2). \quad (2.79)$$

O tensor métrico do espaço tridimensional nas proximidades da superfície terá componentes dadas por,

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial u_i} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial u_j}, \quad (2.80)$$

usando as equações (2.80) e (2.81), temos que

$$G_{ij} = g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} u_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} (u_3)^2, \quad (2.81)$$

com,

$$G_{i3} = G_{3i} = 0, \quad G_{33} = 1, \quad i = 1, 2. \quad (2.82)$$

Dada essas considerações geométricas podemos voltar nossas atenções para a equação de Schrödinger. Vamos aproveitar a equação (2.86) e substituir g^{kj} por G^{kj} e $V(\mathbf{u}')$ por

$V_\lambda(u_3)$, fazendo isso obtemos a seguinte equação,

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right)+V_\lambda(u_3)\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad (2.83)$$

aonde $G = \det(G_{ij})$. A equação (2.85) é a equação de Schrödinger para um sistema de referências curvilíneo (u_1, u_2, u_3) , o potencial $V_\lambda(u_3)$ é o potencial responsável pelo confinamento da partícula na superfície, λ é o “parâmetro de compressão” que mede a intensidade do potencial confinante, definimos esse potencial da seguinte maneira:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(u_3) = \begin{cases} 0, & u_3 = 0, \\ \infty, & u_3 \neq 0. \end{cases} \quad (2.84)$$

Para guiar nossa intuição, da Costa deu como exemplo um potencial $V_\lambda(u_3) = \frac{1}{2}m\lambda^2 u_3^2$, com λ indo eventualmente para o infinito temos $\langle u_3^2 \rangle \simeq \hbar/2m\lambda$. Observando a equação (2.93) vemos que o tensor métrico do espaço euclidiano G_{ij} é igual o tensor métrico da superfície mais termos dependentes da direção normal, isso significa que nos podemos separar o primeiro termo da equação (2.95) em duas partes, uma parte normal, e outra superficial. Façamos isso, tomando $i, j = 1, 2$ e u_3 no Laplaciano da equação (2.85), temos

$$\frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right) = \frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right). \quad (2.85)$$

Fazendo $i, j = 3$, obtemos que

$$\frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right) = \frac{\partial^2\psi}{\partial u_3^2} + \frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial\psi}{\partial u_3}(\sqrt{G})\frac{\partial\psi}{\partial u_3}, \quad (2.86)$$

ou,

$$\frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{G}G^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right) = \frac{\partial^2\psi}{\partial u_3^2} + \frac{\partial\psi}{\partial u_3}(\ln G)\frac{\partial\psi}{\partial u_3}. \quad (2.87)$$

Consequentemente, ficamos com a seguinte equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial\psi}{\partial u_j}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial u_3^2} + \frac{\partial\psi}{\partial u_3}(\ln G)\frac{\partial\psi}{\partial u_3}\right) + V_\lambda(u_3)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (2.88)$$

Como estamos esperando que exista uma função de onda superficial, que dependa somente de u_1 e u_2 , vamos introduzir uma nova função de onda $X(u_1, u_2, u_3) = X_t(u_1, u_2)X_n(u_3)$, a condição de normalização da função de onda será satisfeita se:

$$\psi(u_1, u_2, u_3) = [f(u_1, u_2, u_3)]^{-1/2}X(u_1, u_2, u_3), \quad (2.89)$$

onde

$$f(u_1, u_2, u_3) = 1 + \mathbf{Tr}(\alpha_{ij})u_3 + \det(\alpha_{ij})u_3^2. \quad (2.90)$$

Podemos agora levar em conta o efeito do potencial confinante $V_\lambda(u_3)$. A partícula nesse caso “sente” duas barreiras potenciais infinitas em ambos os lados da superfície ($u_3 \neq 0$), a função de onda será então somente diferente de zero na região muito próxima a $u_3 = 0$, portanto podemos tomar o limite em que $u_3 \rightarrow 0$, e após substituirmos (2.91) em (2.90), nos restará somente,

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial X}{\partial u_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \mathbf{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \mathbf{det}(\alpha_{ij}) \right) X - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 X}{\partial u_3^2} + V_\lambda(u_3)X = i\hbar \frac{\partial X}{\partial t}. \quad (2.91)$$

Podemos separar essa equação escrevendo $X(u_1, u_2, u_3) = X_t(u_1, u_2, t)X_n(u_3, t)$, fazendo isso, temos duas equações separadas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 X_n}{\partial u_3^2} + V_\lambda(u_3)X_n = i\hbar \frac{\partial X_n}{\partial t}, \quad (2.92)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial X_t}{\partial u_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \mathbf{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \mathbf{det}(\alpha_{ij}) \right) X_t = i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t}. \quad (2.93)$$

A equação (2.94) é uma equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula sob a ação do potencial $V_\lambda(u_3)X_n$, já a equação (2.85) é uma equação de Schrödinger bidimensional para uma partícula que sofre a ação de um potencial superficial $V_S(u_1, u_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \mathbf{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \mathbf{det}(\alpha_{ij}) \right)$, esse potencial pode ser escrito de uma forma mais interessante, considerando as equações (2.61) e (2.62):

$$V_S(u_1, u_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K), \quad (2.94)$$

onde M é a curvatura média, e K é a curvatura gaussiana.

A partir de agora chamaremos o potencial (2.93) de potencial da Costa $V_{dC}(u_1, u_2)$. Como da Costa observou, a presença de M em V_{dC} torna a dependência do potencial em função das coordenadas q especialmente notável, pois a curvatura média não pode ser determinada apenas em função de g_{ij} e suas derivadas, como acontece por exemplo com K [41]. Esse fato nos leva a uma importante consequência: $V_{dC}(u_1, u_2)$ não será o mesmo para superfícies isométricas [10]. Em superfícies isométricas pontos correspondentes podem ser encontrados com o mesmo g_{ij} , isso significa que o potencial da Costa é determinado pelas propriedades geométricas da superfície em questão, mas também depende do espaço aonde essa superfície está imersa. Esse

resultado não é muito difícil de ser entendido, o fato é que nosso procedimento de imersão não é perfeito. A partícula nunca estará exatamente na posição $u_3 = 0$, mas ela poderá tomar pequenos valores na direção normal à superfície, sendo assim a partícula “sente” o mundo tridimensional aonde a superfície está embutida.

2.4 Aplicação: Partícula Nas Superfícies De Uma Esfera, Cilindro, E Cone Duplo.

Aplicaremos agora, de modo ilustrativo, os resultados obtidos na secção anterior para uma partícula restrita em duas diferentes superfícies: esfera, cilindro, e cone duplo. Em todos os casos buscaremos obter a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa m restrita em uma superfície de métrica g_{ij} :

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\psi(u,v)\right) - V_{dC}\psi(u,v) = E\psi(u,v). \quad (2.95)$$

2.4.1 A Esfera:

Consideremos a seguinte parametrização, em coordenadas cartesianas, para uma esfera de raio a :

$$\begin{cases} x = a \cos u \sin v \\ y = a \sin u \sin v \\ z = a \cos v \end{cases} \quad (2.96)$$

onde $u \in (0, 2\pi]$ e $v \in (0, \pi]$. Podemos mapiar a esfera por usando as coordenadas u e v :

$$\mathbf{r}(u,v) = (a\cos u \sin v, a\sin u \sin v, a\cos v) \quad (2.97)$$

Em coordenadas cartesianas, as componentes dos vetores tangentes são dadas por:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_u = \partial_u \mathbf{r}(u,v) = (-a\sin u \sin v, a\cos u \sin v, 0), \\ \mathbf{e}_v = \partial_v \mathbf{r}(u,v) = (a\cos u \cos v, a\sin u \cos v, -a\sin v). \end{cases} \quad (2.98)$$

As componentes da primeira forma fundamental são:

$$\begin{cases} E = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u = a^2 \sin^2 u \sin^2 v + a^2 \cos^2 u \sin^2 v = a^2 u \sin^2 v \\ F = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_v = -a^2 \sin u \sin v \cos u \cos v + a^2 \sin u \sin v \cos u \cos v = 0 \\ G = \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{e}_v = a^2 \cos^2 u \cos^2 v + a^2 \sin^2 u \cos^2 v + a^2 \sin^2 v = a^2 \end{cases} \quad (2.99)$$

Portanto temos o seguinte tensor métrico:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & a^2 \text{Sen}^2 v \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

O vetor normal à superfície é igual a

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v}{|\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v|} = -[\text{Cos}u \text{ Sen}v \hat{x} + \text{Senu} \text{ Sen}v \hat{y} + \text{Cos}v \hat{z}]. \quad (2.101)$$

Podemos então calcular as componentes da segunda forma fundamental:

$$\begin{cases} e = \partial_u \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{n} = a \text{Sen}^2 v \\ f = \partial_u \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = 0 \\ g = \partial_v \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = a \end{cases} \quad (2.102)$$

Substituindo os valores obtidos em (2.90) e em (2.93), nas equações (2.51) e (2.52), obtemos a curvatura média e a curvatura gaussiana para uma esfera:

$$\begin{cases} K = \frac{1}{a^2}, \\ M = \frac{1}{a}. \end{cases} \quad (2.103)$$

Calculamos então o potencial da Costa para a superfície de uma esfera:

$$V_{Dc} = \frac{-\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{a^2} \right) = 0. \quad (2.104)$$

Ou seja, para a superfície de uma esfera o potencial da Costa é nulo, sendo assim a curvatura da esfera não interfere na dinâmica da partícula. Como a curvatura não exerce nenhum tipo de ação sobre a mecânica quântica da partícula, os resultados contidos em livros texto em mecânica quântica sobre a resolução de problemas com simetria esférica, continuam válidos.

2.4.2 O Cilindro:

Para um cilindro circular finito de raio a , usaremos a seguinte parametrização [41]:

$$\mathbf{r}(u, v) = (a \text{Cos} v, a \text{Sen} v, u) \quad (2.105)$$

onde $u \in [0, L]$ e $v \in (0, 2\pi]$. Primeiramente calculemos os vetores tangentes à superfície do cilindro, em coordenadas cartesianas as componentes desses vetores são:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_u = \partial_u \mathbf{r}(u, v) = (0, 0, 1), \\ \mathbf{e}_v = \partial_v \mathbf{r}(u, v) = (-a \text{Sen} v, a \text{Cos} v, 0). \end{cases} \quad (2.106)$$

As componentes da primeira forma fundamental são:

$$\begin{cases} E = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u = 1 \\ F = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_v = 0 \\ G = \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{e}_v = a^2(\text{Sen}^2 v + \text{Cos}^2 v) = a^2 \end{cases} \quad (2.107)$$

Consequentemente temos o seguinte tensor métrico:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a^2 \end{pmatrix} \quad (2.108)$$

O vetor normal à superfície do cilindro será igual a

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v}{|\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v|} = -[\text{Cos } v \hat{x} + \text{Sen } v \hat{y}]. \quad (2.109)$$

Calculemos então as componentes da segunda forma fundamental:

$$\begin{cases} e = \partial_u \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{n} = 0 \\ f = \partial_u \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = 0 \\ g = \partial_v \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = a \end{cases} \quad (2.110)$$

As curvaturas gaussiana e média serão iguais a

$$\begin{cases} K = 0, \\ M = \frac{1}{2a}. \end{cases} \quad (2.111)$$

Portanto o potencial da Costa para a superfície de um cilindro será igual a

$$V_{Dc} = \frac{-\hbar^2}{2m}(M^2 - K) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a^2}. \quad (2.112)$$

Agora estamos em condições de discutir sobre a mecânica quântica na superfície de um cilindro circular finito. Segundo a métrica (2.108) e a (2.95), teremos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo, para a superfície de um cilindro:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{g}} \partial_i \left(\sqrt{g} g^{ij} \partial_j \psi(u, v) \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4a^2} \psi(u, v) = E \psi(u, v). \quad (2.113)$$

Substituindo os valores de g e g^{ij} , temos que

$$-\partial_u^2 \psi(u, v) - \frac{1}{a^2} \partial_v^2 \psi(u, v) - \frac{1}{4a^2} \psi(u, v) = \epsilon \psi(u, v), \quad (2.114)$$

onde $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$. Devido a simetria do cilindro, esperamos que a função de onda em torno do cilindro seja periódica, deve-se então ter uma solução do tipo exponencial para este caso: $\{e^{ilv}\}$. Isso nos permite realizar uma separação de variáveis escrevendo a função de onda como $\psi(u, v) = \phi(u)e^{ilv}$, ficamos então com a seguinte equação:

$$-e^{ilv}\phi''(u) + \frac{e^{ilv}\phi(u)}{a^2}l^2 - \frac{\phi(u)e^{ilv}}{4a^2} = \varepsilon\phi(u)e^{ilv}, \quad (2.115)$$

dividindo tudo por e^{ilv}

$$-\phi''(u) + \frac{l^2}{a^2}\phi(u) - \frac{\phi(u)}{4a^2} = \varepsilon\phi(u). \quad (2.116)$$

onde l é um número inteiro e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. A equação (2.116) é uma equação de Schrödinger para uma partícula que se move paralelamente ao eixo do cilindro, entre 0 e L , vamos então impor a seguinte condição de contorno para $\phi(u)$:

$$\phi(u=0) = \phi(u=L) = 0. \quad (2.117)$$

Vamos reescrever a equação (2.116) como

$$\phi(u)'' + k^2\phi(u) = 0 \quad (2.118)$$

sendo $k^2 = \varepsilon + 1/4a^2 - l^2/a^2$. A solução esperada deve ser do tipo:

$$\psi(u) = A\cos(ku) + B\sin(ku) \quad (2.119)$$

onde A e B são constantes. Aplicando (2.117), e normalizando para o intervalo considerado, temos que nossa função de onda será

$$\phi(u) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}u\right), \quad (2.120)$$

onde $kL = n\pi$, e $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Consequentemente, o espectro de energia será:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2\pi^2}{L^2} - \frac{l^2}{a^2} - \frac{1}{4a^2} \right) \quad (2.121)$$

. A exponencial é normalizada para o intervalo $(0, 2\pi)$ pela constante $1/\sqrt{2\pi}$. Portanto nossa função de onda completa será

$$\psi(u, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}u\right)e^{ilv} \quad (2.122)$$

2.4.3 O Cone Duplo

Consideremos uma superfície cônica (cone duplo) de abertura 2θ . Essa superfície é parametrizada pela seguinte equação:

$$\mathbf{r}(u, v) = (u \text{Sen} \theta \text{Cos} v, u \text{Sen} \theta \text{Sen} v, u \text{Cos} \theta) \quad (2.123)$$

onde $u \in (-\infty, \infty)$, $v \in [0, 2\pi)$, e θ é uma constante. considerando essa parametrização calculamos os vetores tangentes à essa superfície:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_u = \partial_u \mathbf{r}(u, v) = (\text{Sen} \theta \text{Cos} v, \text{Sen} \theta \text{Sen} v, \text{Cos} \theta), \\ \mathbf{e}_v = \partial_v \mathbf{r}(u, v) = (-u \text{Sen} \theta \text{Sen} v, u \text{Sen} \theta \text{Cos} v, 0). \end{cases} \quad (2.124)$$

As componentes da primeira forma fundamental são:

$$\begin{cases} E = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u = 1, \\ F = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_v = 0, \\ G = \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{e}_v = u^2 \text{Sen}^2 \theta. \end{cases} \quad (2.125)$$

Portanto temos o seguinte tensor métrico:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & u^2 \text{Sen}^2 \theta \end{pmatrix} \quad (2.126)$$

Calculamos também o vetor normal à superfície:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v}{|\mathbf{e}_u \times \mathbf{e}_v|} = \frac{-[u \text{Sen} \theta \text{Cos} \theta \text{Cos} v \hat{x} + u \text{Sen} \theta \text{Cos} \theta \text{Sen} v \hat{y} - u \text{Sen}^2 \theta \hat{z}]}{u \text{Sen} \theta}. \quad (2.127)$$

Sendo assim os elementos da segunda forma fundamental podem ser calculados:

$$\begin{cases} e = \partial_u \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{n} = 0, \\ f = \partial_u \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = 0, \\ g = \partial_v \mathbf{e}_v \cdot \mathbf{n} = u \text{Sen} \theta \text{Cos} \theta. \end{cases} \quad (2.128)$$

Quando aplicamos os resultados acima nas equações (2.61) e (2.62) verificamos que a curvatura gaussiana é nula, enquanto que a curvatura média é dada por

$$M(u) = \frac{|u| \sqrt{1 - \text{Sen}^2 \theta}}{2u^2 \text{Sen} \theta}. \quad (2.129)$$

Deste modo o potencial da Costa é igual a

$$V_{dC}(u) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1 - \text{Sen}^2\theta}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \right). \quad (2.130)$$

Obteremos agora a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula na superfície de um cone. Substituindo as equações (2.126) e (2.130) em (2.95), obtemos que

$$-\partial_u^2 \Psi(u, v) - \frac{1}{u} \partial_u \Psi(u, v) - \frac{1}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \partial_v^2 \Psi(u, v) - \left(\frac{1 - \text{Sen}^2\theta}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \right) \Psi(u, v) = \varepsilon \Psi(u, v) \quad (2.131)$$

onde $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$. Tal como no caso do cilindro escreveremos nossa solução como

$$\Psi(u, v) = \phi(u) e^{inv}. \quad (2.132)$$

Ficamos então com

$$-\phi''(u) - \frac{1}{u} \phi'(u) + \frac{n^2}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \phi(u) - \left(\frac{1 - \text{Sen}^2\theta}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \right) \phi(u) = \varepsilon \phi(u). \quad (2.133)$$

O Hamiltoniano para essa partícula é portanto igual a

$$H = \frac{1}{2m} P_u^2 + \frac{i\hbar}{2mu} P_u + V_{eff}(u) \quad (2.134)$$

onde $P_u = -i/dx$ é o operador momento linear, e V_{eff} é o potencial efetivo da equação (2.134). Como podemos ver esse Hamiltoniano não é hermitiano. Porém, a não hermiticidade de um Hamiltoniano não será um problema se ele preservar simultaneamente a simetria \mathcal{PT} , ou seja, se ele for invariante sob troca de paridade (\mathcal{P}) e inversão temporal (\mathcal{T}) [44, 45]. Como esse é o caso deste Hamiltoniano podemos obter um Hamiltoniano hermitiano equivalente. Para obtermos isso escreveremos a função de onda como $\phi(u) = N(u)\psi(u)$, sendo $N(u)$ uma função de u que será determinada de modo que o segundo termo da equação (2.133) seja nulo, e $\psi(u)$ é uma função de onda que obedece a Schrödinger. Seja então $N'(u)/N(u) = -1/2u$, ficamos com a seguinte equação:

$$-\psi''(u) + V_{eff}(u)\psi(u) = \varepsilon\psi(u), \quad (2.135)$$

onde V_{eff} é o potencial efetivo dado por:

$$V_{eff}(u) = - \left[\left(\frac{1 - \text{Sen}^2\theta}{u^2 \text{Sen}^2\theta} \right) - \frac{n^2}{u^2 \text{Sen}^2\theta} + \frac{1}{4u^2} \right] \quad (2.136)$$

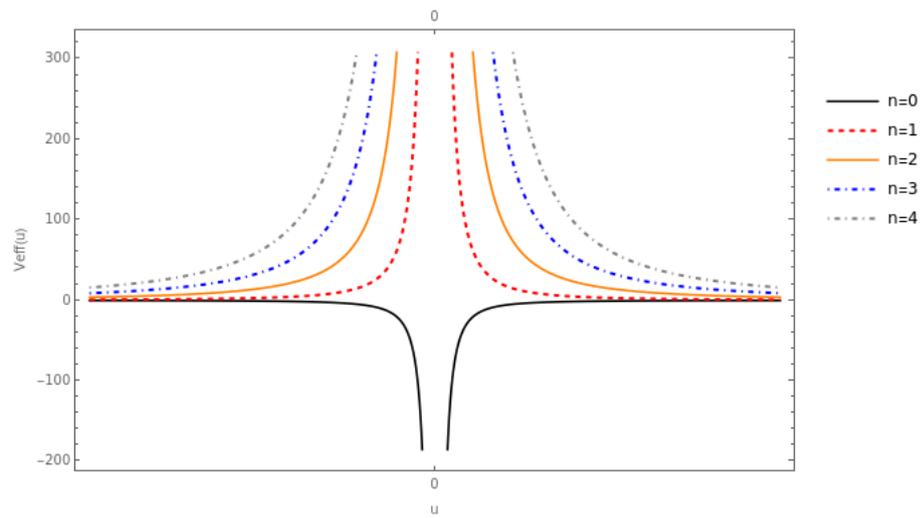


Figura 3 – Potencial efetivo (2.136).

3 A FITA DE MÖBIUS

A fita de Möbius (Figura 4) é uma superfície regrada não-orientável de um único lado. Seu nome é devido a August Ferdinand Möbius, que a estudou em 1858, embora Johann Benedict também a tenha estudado independentemente na mesma época [46]. Com propriedades fascinantes, esse objeto despertou interesse tanto em cientistas como no público geral, tornando-se até mesmo um símbolo para o infinito. Mais recentemente a fita de Möbius despertou interesse aos físicos da matéria condensada principalmente devido a possibilidade de se construir uma fita de Möbius feita de folhas de grafeno [31, 32, 33, 34, 35, 36]. Neste capítulo mostraremos as propriedades básicas da fita de Möbius, tal como sua parametrização, curvatura etc. Obteremos as equações de movimento de uma partícula clássica e mostraremos a influência da curvatura na sua dinâmica. Posteriormente, mostraremos alguns resultados disponíveis na literatura atual sobre a mecânica quântica não relativística na fita de Möbius. Esses trabalhos investigaram o comportamento quântico de uma partícula sem spin na fita de Möbius, com ou sem campo externo, por meio da resolução da equação de Schrödinger. Resolver essa equação nos permite encontrar o comportamento da função de onda da partícula e, por exemplo, determinar as propriedades eletrônicas da fita de Möbius.

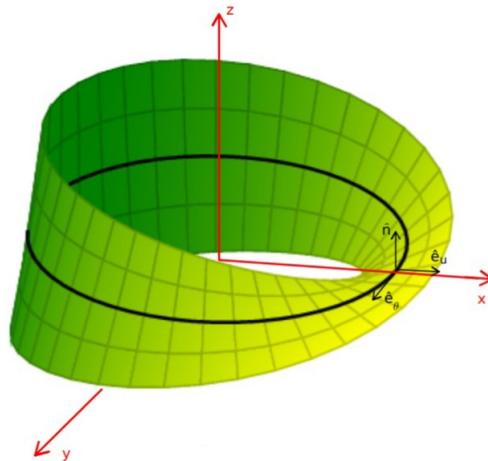


Figura 4 – Fita de Möbius com um referencial local determinado pelos vetores tangentes \hat{e}_u , \hat{e}_θ , e o vetor normal \hat{n} .

3.1 Propriedades Geométricas da Fita de Möbius.

A construção da fita de Möbius consiste em tomar uma fita retangular de comprimento L e largura $2w$, efetuar uma rotação de 180° em uma das extremidades, e então colar uma

na outra. Para uma fita de Möbius de raio interno a , comprimento L , e largura $2w$, podemos usar a seguinte parametrização[47, 48]:

$$\mathbf{r}(u, \theta) = a(\cos\theta, \sin\theta, 0) + u\left(\cos\frac{\theta}{2}\cos\theta, \cos\frac{\theta}{2}\sin\theta, \sin\frac{\theta}{2}\right), \quad (3.1)$$

onde u é a coordenada que mede a distância entre um ponto e o círculo interno, medida na largura da fita, com $-w < u < w$, e θ percorre o entorno da fita, ou seja $0 \leq \theta \leq 2\pi$. Em coordenadas cilíndricas a fita de Möbius pode ser parametrizada como,

$$\mathbf{r}(u, \theta) = \left(a + u\cos\frac{\theta}{2}\right)\hat{\rho} + u\sin\frac{\theta}{2}\hat{k}, \quad (3.2)$$

aonde $\vec{r}(u, \theta)$ é o vetor posição de um ponto sobre a fita de Möbius. Iremos considerar u e θ como coordenadas de um sistema de coordenadas curvilíneas definidas sobre a fita de Möbius, sendo assim passamos a considerá-la como uma superfície bi-dimensional imersa no espaço euclidiano, cada ponto será então determinado pelas coordenadas (u, θ) . Calculemos então os vetores tangentes à superfície determinada por $\mathbf{r}(u, \theta)$:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_u = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} = \cos\frac{\theta}{2}\hat{\rho} + \sin\frac{\theta}{2}\hat{k} \\ \mathbf{e}_\theta = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = -\frac{u}{2}\sin\frac{\theta}{2}\hat{\rho} + \left(a + u\cos\frac{\theta}{2}\right)\hat{\theta} + \frac{u}{2}\cos\frac{\theta}{2}\hat{k}. \end{cases} \quad (3.3)$$

As componentes da primeira forma fundamental são:

$$\begin{cases} E = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u = 1, \\ F = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{e}_u = \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_\theta = 0. \\ G = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{e}_\theta = \frac{u^2}{4} + \left(a + u\cos\frac{\theta}{2}\right)^2. \end{cases} \quad (3.4)$$

A partir dos vetores tangentes podemos definir o tensor métrico para nossa superfície:

$$g_{ab} = \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b. \quad (3.5)$$

O nosso tensor métrico terá a seguinte forma matricial:

$$g_{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \beta^2(u, \theta) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

onde,

$$\beta(u, \theta) = \sqrt{\frac{u^2}{4} + \left(a + u\cos\frac{\theta}{2}\right)^2}. \quad (3.7)$$

Portanto, o elemento infinitesimal ds^2 será dado por

$$ds^2 = du^2 + \beta^2(u, \theta)d\theta^2, \quad (3.8)$$

Podemos observar de (3.7) que $\beta(u, \theta)$ é invariante para $\theta \rightarrow -\theta$, contudo, ela não é simétrica em u . O vetor normal é dado por:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\hat{\mathbf{e}}_u \times \hat{\mathbf{e}}_\theta}{|\hat{\mathbf{e}}_u \times \hat{\mathbf{e}}_\theta|} \quad (3.9)$$

ou seja,

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{\beta} \left[-\text{Sen} \frac{\theta}{2} (a + u \text{Cos} \frac{\theta}{2}) \hat{\rho} - \frac{u}{2} \hat{\theta} + \text{Cos} \frac{\theta}{2} (a + u \text{Cos} \frac{\theta}{2}) \hat{k} \right] \quad (3.10)$$

As componentes da segunda forma fundamental são:

$$\begin{cases} e = 0 \\ f = \frac{a}{\sqrt{4a^2 + 3u^2 + 2u[4a \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u \text{Cos} \theta]}} \\ g = \frac{[2(a^2 + u^2) + 4au \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u^2 \text{Cos} \theta] \text{Sen} \frac{\theta}{2}}{\sqrt{4a^2 + 3u^2 + 2u[4a \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u \text{Cos} \theta]}} \end{cases} \quad (3.11)$$

A curvatura média M , e a curvatura gaussiana K , da fita de Möbius calculados por meio das equações (2.51) e (2.52), E são dadas por [40]

$$M(u, \theta) = \frac{2[2(a^2 + u^2) + 4au \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u^2 \text{Cos} \theta] \text{Sen} \frac{\theta}{2}}{(4a^2 + 3u^2 + 2u[4a \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u \text{Cos} \theta])^{3/2}}. \quad (3.12)$$

$$K(u, \theta) = -\frac{4a^2}{(4a^2 + 3u^2 + 2u[4a \text{Cos} \frac{\theta}{2} + u \text{Cos} \theta])^2} \quad (3.13)$$

As curvaturas média e gaussiana da fita de Möbius, estão plotadas nas figuras (5) e (6), respectivamente.

3.2 Partícula Clássica na Fita de Möbius.

Consideremos o movimento clássico de uma partícula de massa m restrita na fita de Möbius. A lagrangeana clássica de uma partícula restrita em uma superfície parametrizada pelas coordenadas generalizadas q^i 's é

$$\mathcal{L}(q^i, \dot{q}^i) = \frac{1}{2} m g_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j + V(q^i), \quad (3.14)$$

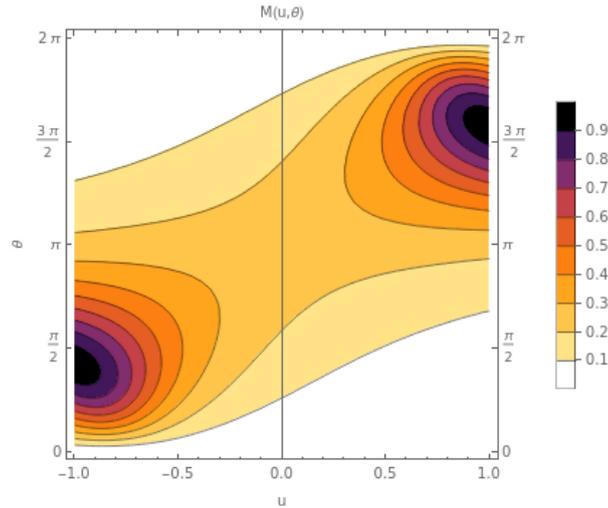


Figura 5 – Curvatura média da fita de Möbius de raio interno $a = 1$, com a variável u pertencente ao intervalo $-1 < u < 1$, e θ pertencente ao intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$.

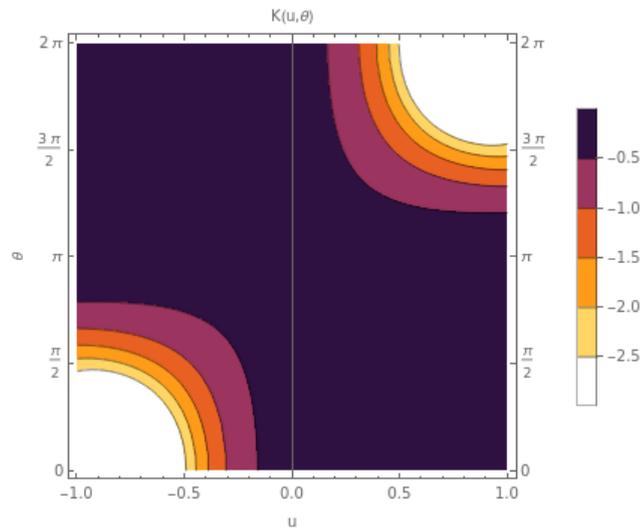


Figura 6 – Curvatura gaussiana da fita de Möbius de raio interno $a = 1$, com a variável u pertencente ao intervalo $-1 < u < 1$, e θ pertencente ao intervalo $0 \leq \theta \leq 2\pi$.

onde g_{ij} é a componente do tensor métrico da superfície, e $V(q_i)$ é um potencial dependente somente das coordenadas q^i 's. As equações de movimento da partícula serão determinadas pela equação de Euler-Lagrange [49]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = 0. \quad (3.15)$$

Tomemos como exemplo os casos de uma partícula clássica restrita na superfície de um cilindro e de um cone duplo.

Cilindro:

Seja uma partícula clássica de massa m na superfície de um cilindro circular reto de raio a , cuja métrica é dada por (2.109), a lagrangiana dessa partícula é igual a

$$\mathcal{L}(u, v) = \frac{1}{2}m[\dot{u}^2 + a^2\dot{v}^2]. \quad (3.16)$$

Para a coordenada u a equação de Euler-Lagrange nos diz que

$$\frac{d}{dt}(m\dot{u}) = 0. \quad (3.17)$$

Como $P_z = m\dot{u}$ é o momento linear na direção u , e sua derivada temporal é nula, concluímos que o momento linear P_u é uma *grandeza conservada* nesse sistema [49]. Na caso da coordenada v , que é a coordenada angular, temos que

$$\frac{d}{dt}(ma^2\dot{v}) = 0. \quad (3.18)$$

Agora $L = ma^2\dot{v}$ é o momento angular orbital da partícula, que como podemos ver também é uma grandeza conservada.

Cone duplo:

Para uma partícula clássica de massa m na superfície de um cone duplo, com métrica dada por (2.128), temos a seguinte lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m[\dot{u}^2 + u\text{Sen}^2\theta\dot{v}^2] \quad (3.19)$$

Para a coordenada u temos que

$$\frac{d}{dt}(m\dot{u}) = u\text{Sen}^2\theta\dot{v}^2. \quad (3.20)$$

Para a coordenada v obtemos,

$$\frac{d}{dt}(mu^2\text{Sen}^2\theta\dot{v}) = 0, \quad (3.21)$$

que é o momento angular da partícula, que como pode ser visto é conservado.

Fita de Möbius:

Voltando para a fita de Möbius, consideremos o movimento de uma partícula clássica em sua superfície. Usando a métrica dada em (3.6) a lagrangiana para essa partícula será:

$$\mathcal{L}(u, \theta, \dot{u}, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}m[\dot{u}^2 + \beta(u, \theta)^2\dot{\theta}^2]. \quad (3.22)$$

Segundo a equação de Euler-Lagrange para a coordenada u temos que,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = m\beta \partial_u \beta \dot{\theta}^2, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} = m\dot{u}. \quad (3.23)$$

Obtemos a seguinte equação de movimento de uma partícula na Fita de Möbius que se move na direção \hat{u} :

$$\ddot{u} - \beta \partial_u \beta \dot{\theta}^2 = 0. \quad (3.24)$$

O segundo termo da equação (3.24) é dependente da velocidade angular ao quadrado, típico de uma força centrífuga, ou seja, o movimento na direção da variável u se parece com o movimento de uma partícula sobre a ação de uma força inercial. Para a coordenada θ , temos que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = m\beta \partial_\theta \beta \dot{\theta}^2, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = m\beta^2 \dot{\theta}. \quad (3.25)$$

Obtemos então a seguinte equação de movimento para uma partícula na fita de Möbius que se move na direção $\hat{\theta}$:

$$\ddot{\theta} - 2\frac{\dot{\beta}}{\beta}\dot{\theta} - \frac{\partial_\theta \beta}{\beta}\dot{\theta}^2 = 0 \quad (3.26)$$

A equação (3.26) tem uma forma bastante semelhante à equação de movimento de uma partícula em um sistema em rotação [50]. O segundo termo depende da equação velocidade angular, tal como o termo da força de Coriolis, e o último termo depende da velocidade angular ao quadrado, como a força centrífuga. Isso significa que a geometria da fita de Möbius induz o surgimento de forças fictícias nas equações de movimento. A segunda equação em (3.25) corresponde ao momento angular orbital da partícula $L = m\beta^2 \dot{\theta}$, diferente do caso do cilindro a derivada temporal desse termo não se anula. Verificamos portanto a existência de um torque externo agindo sobre a partícula:

$$\frac{d}{dt}(m\beta^2 \dot{\theta}) = m\beta \partial_\theta \beta \dot{\theta}^2. \quad (3.27)$$

Conseqüentemente o momento angular de uma partícula clássica na fita de Möbius não se conserva. Concluimos que o efeito da geometria da fita de Möbius na dinâmica de uma partícula é o surgimento de forças fictícias e a não conservação do momento angular. Contudo, pode-se observar que se $u = 0$, $\beta(u, \theta)$ se torna constante e igual a a , e conseqüentemente as equações de movimento (3.24) e (3.27) se transformam em equações de movimento de uma partícula livre. Neste caso, a equação (3.27) se torna igual a $\frac{d}{dt}(ma^2 \dot{\theta}) = 0$, sendo portanto conservado o momento angular.

3.3 Revisão da Mecânica Quântica na Fita de Möbius

O interesse em se estudar a mecânica quântica de partículas restritas na fita de Möbius vem principalmente de dois fatores, primeiramente tem-se observado que existem estruturas na natureza que exibem uma geometria do tipo da fita de Möbius, como é o caso dos cristais de NbSe₃ [37] e outras moléculas orgânicas [29]. E além disso, graças ao desenvolvimento da nanotecnologia podemos construir dispositivos em escalas cada vez menores, e que possuem geometrias não triviais como por exemplo uma fita com geometria do tipo da fita de Möbius. Considerando os trabalhos publicados que tiveram como objetivo analisar a dinâmica quântica de partículas na fita de Möbius, encontramos tanto o uso da abordagem intrínseca, como da abordagem extrínseca. Dentre eles, damos ênfase ao trabalho de J. Gravesen e M. Willatzen, publicado em 2005, e ao trabalho de Zehao Li e L. R. Ram-Mohan, publicado em 2012. Damos ênfase a esses dois trabalhos porque neles temos a utilização clara das duas abordagens discutidas nesta dissertação.

Começando pela abordagem intrínseca, temos o trabalho de Zehao Li e L. R. Ram-Mohan, que investigaram os níveis de energia de um elétron restrito na fita de Möbius, em um nível nanométrico, por meio da resolução da equação de Schrödinger em uma superfície curva [27]. Neste trabalho as coordenadas na fita de Möbius foram determinadas em termos dos parâmetros $\{u, v\}$, de modo semelhante com o que faremos aqui, porém no caso deles temos que $0 \leq u \leq 2\pi$ e $-1 \leq v \leq 1$. Isso permitiu que eles rotulassem os níveis quânticos pelos números (n_u, n_v) . Zehao e Ram-Mohan começam com a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo para coordenadas curvilíneas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\det|g|}} \partial_\mu \left(\sqrt{\det|g|} g^{\mu\nu} \partial_\nu \psi \right) = E \psi \quad (3.28)$$

Como podemos observar essa equação não possui nenhum potencial geométrico, isso acontece porque os autores não consideraram o efeito da curvatura extrínseca na problema, sendo usado portanto uma abordagem intrínseca. Partindo então da equação (3.28) os autores atacaram o problema por meio do método de elementos finitos [51]. Esse método pode ser visualizado como a discretização da ação integral. No caso de espaços curvos a ação da equação de Schrödinger é

$$S = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} g^{\mu\nu} \partial_\mu \psi^* \partial_\nu \psi - E \psi^* \psi \right) \sqrt{\det|g|} dx^\mu dx^\nu. \quad (3.29)$$

Com base nessas considerações, obter as equações (3.28) e (3.29), para o caso considerado, é uma tarefa fácil. Definindo-se também os operadores momento linear e momento angular, pode-se

fazer considerações sobre o hamiltoniano da partícula na fita de Möbius. Esse hamiltoniano mostra-se ser invariante sobre paridade, porém verifica-se que o momento angular não comuta com esse hamiltoniano, isso significa que o problema não possui uma simetria axial. Ainda em relação ao momento angular, verifica-se também que os valores esperados de \mathbf{L}_z são próximos de múltiplos inteiros e meio inteiros de \hbar . Zehao e Ram-Mohan também consideraram faixas de Möbius com múltiplas rotações, ou seja, além da rotação inicialmente efetuada para construir a fita de Möbius, adiciona-se σ novas rotações na mesma direção da primeira. Neste caso, observa-se que estados com momento angular meio-inteiros estão presentes apenas em fitas de Möbius com número σ ímpar. Um efeito da curvatura na fita de Möbius é a divisão do estado de energia, que ocorre apenas em estados aonde $2n_u = s\sigma$, com s inteiro, segundo os autores isso pode ser entendido em termos da representação de grupos rotacionais discretos. Em relação aos níveis de energia, podemos prever que haverá proximidade entre os níveis de energia de uma partícula na fita de Möbius, e uma partícula restrita na superfície de um anel cilíndrico, devido à semelhança geométrica entre as duas superfícies. Conforme os autores afirmaram espera-se que os níveis de energia na fita de Möbius, de raio interno r , e largura $2w$, sejam próximos de

$$E_{n_u, n_v} \approx -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_u^2}{r^2} + \frac{\pi^2 n_v^2}{4w^2} \right), \quad (3.30)$$

que são os níveis de energia de um cilindro circular de altura $2w$ e raio a . Conforme foi mostrado no artigo tal analogia entre a fita de Möbius e o cilindro é confirmada (TABELA I [27]). E como último resultado notável desse trabalho, temos o fato que a existência de uma variância diferente de zero do momento angular permite transições entre estados de momento angular meio-inteiros e inteiro, enquanto o momento linear unitário dos fótons é preservado. A partir desse breve resumo dos resultados encontrados por Zehao Li e Ram-Mohan, notamos o quão interessante pode ser analisar a mecânica quântica em uma superfície como a fita de Möbius. Contudo, como já observamos anteriormente, a abordagem intrínseca não é a mais próxima da realidade pois não leva em consideração o processo de confinamento, e nem a geometria do espaço de imersão.

Consideremos agora o trabalho de J. Gravesen e M. Willatzen [4], nele podemos encontrar resultados interessantes que demonstram como a curvatura, e o processo de confinamento, podem mudar as propriedades físicas da fita de Möbius. No trabalho em questão são calculados os autoestados, e as autoenergias associadas, de uma partícula quântica ligada a uma camada de Möbius, incluindo as contribuições de curvatura para o operador de energia cinética. O espaço euclidiano é parametrizado pelas coordenadas (u^1, u^2, u^3) e a função de onda na fita de Möbius é dada por $\chi(u^1, u^2)$. A equação de Schrödinger independente do tempo obtida por eles

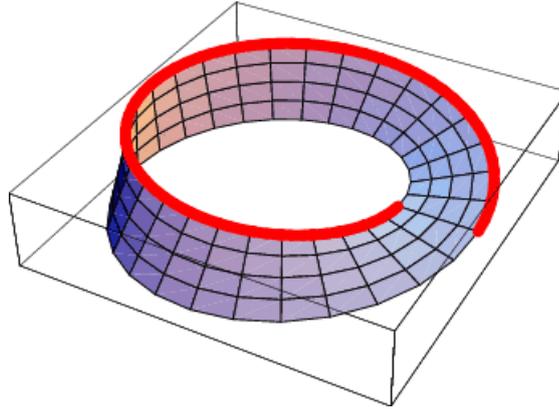


Figura 7 – Trajetória na fita de Möbius conectando dois lados opostos de suas bordas após uma volta completa em torno da fita [3] .

é:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_0 + \partial_3^2)\chi(u^1, u^2) + V(u^1, u^2, u^3)\chi(u^1, u^2) = E\chi(u^1, u^2), \quad (3.31)$$

aonde $V(u^1, u^2, u^3)$ é um potencial confinante que toma um valor infinitamente grande nas regiões próximas da superfície, mas sobre a superfície é zero. O operador Δ_0 é dado por:

$$\Delta_0 = \Delta_\Sigma + M^2 - K, \quad (3.32)$$

aonde Δ_Σ é o operador de Laplace-Beltrami, M é a curvatura média, e K é a curvatura gaussiana. Considerando uma fita de Möbius de comprimento L , e largura $2w$, as condições de contorno que $\chi(u^1, u^2)$ deve obedecer são dadas por:

$$\begin{cases} \chi(u^1, u^2 = -w) = \chi(u^1, w) = 0, \\ \chi(u^1 = 0, u^2) = \chi(u^1 = L, -u^2). \end{cases} \quad (3.33)$$

A primeira dessas condições determina que a função de onda exista somente na fita e que ela se anula nas extremidades. A segunda condição incorpora as características geométricas da fita de Möbius, no qual temos um tipo diferente de periodicidade, já que efetuar uma volta completa na fita de Möbius nos leva a um lugar diferente do qual partimos. Mais precisamente, a fita de Möbius conecta pontos que são equidistantes em relação ao centro da fita, mas que estão em lados opostos (figura 7). Os autores também fazem uma analogia entre a fita de Möbius e o cilindro, por exemplo, as condições de contorno de $\chi(u^1, u^2)$ em um cilindro com as mesmas dimensões da fita de Möbius são:

$$\begin{cases} \chi_{cilindro}(u^1, u^2 = -w) = \chi(u^1, w)_{cilindro} = 0, \\ \chi(u^1 = 0, u^2)_{cilindro} = \chi(u^1 = L, u^2)_{cilindro}. \end{cases} \quad (3.34)$$

Um fato interessante no trabalho de Gravesen e Willatzen é que eles empregam métodos da geometria diferencial para encontrar a geometria da fita de Möbius. Eles realizaram isso por meio da minimização da energia elástica de toda estrutura. Usando essa parametrização, o operador (3.32) torna-se igual a

$$\Delta_0 = \partial_1^2 + \partial_2^2 + M^2. \quad (3.35)$$

Observemos que agora a curvatura gaussiana é nula, acontece que Gravesen e Willatzen estão considerando a forma desenvolvível da fita de Möbius, na qual a energia elástica da estrutura é minimizada [52]. Neste ponto também temos um diferencial em relação ao trabalho descrito anteriormente, Zehao Li e Ram-Mohan consideraram uma espaço geométrico abstrato aonde tínhamos uma torção constante.

A curvatura média ao quadrado, M^2 , é uma função bastante complicada de u^1 e u^2 , novamente vemos que não é possível realizar uma separação de variáveis na fita de Möbius. Os autores resolveram a equação (3.31), com Δ_0 dado por (3.35) usando o método de elementos finitos. Neste trabalho temos uma diferenciação entre o problema de Möbius-plano, e o problema da estrutura de Möbius. O problema de Möbius-plano é caracterizado pela solução da equação de Schrödinger utilizando as condições de contorno (3.33), e pelo o descarte da contribuição da curvatura. Já no problema da estrutura de Möbius, os autores utilizam a parametrização encontrada pela minimização da energia elástica, aonde a curvatura gaussiana é nula, e somente existe contribuição da curvatura média M . O problema de Möbius-plano é próximo do problema do cilindro, verifica-se que os autoestados do problema de Möbius-plano no intervalo $(u^1, u^2) = [0; L] \times [-w; w]$ também são autoestados do problema do cilindro no intervalo $(u^1, u^2) = [0; 2L] \times [-w; w]$. Na figura 8 temos os três primeiros autoestados para os dois problemas considerados, nos gráficos à esquerda estão representados os autoestados do problema de Möbius plano, aonde não temos a influência da curvatura. Nos gráficos à direita temos os autoestados do problema da estrutura de Möbius, aonde temos o efeito da curvatura. Os autovalores da energia para o problema de Möbius-plano são dados por:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{m\pi}{2L} \right)^2 + \left(\frac{(2n+1)\pi}{2w} \right)^2 \right] \quad (3.36)$$

aonde $m = \pm 2, \pm 6, \pm 10$ e $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.

O estudo da mecânica quântica na superfície de uma fita de Möbius possui dois aspectos principais: determinação da geometria da fita, e a determinação de condições de contorno apropriadas. Antes de considerarmos o problema de descrever a dinâmica de uma

partícula quântica na fita de Möbius, precisamos decidir como a fita será construída, pois isso afetará os resultados obtidos. Ao impor condições de contorno na fita de Möbius, estamos supondo que a partícula sente na direção transversal a ação de uma barreira infinita nas suas extremidades, forçando que a função de onda se anule ali. E na longitudinal temos uma condição de contorno periódica própria da fita de Möbius [30, 26]. Por exemplo, construindo uma fita de Möbius a partir de uma faixa retangular de largura $2w$ e comprimento L , temos as seguintes condições:

$$\begin{cases} \psi(-w, y) = \psi(w, y) = 0, \\ \psi(x, y) = \psi(-x, w + L) = 0 \end{cases} \quad (3.37)$$

Além destes dois aspectos fundamentais, temos uma característica importante que foi recorrentemente considerada, que é a semelhança entre a fita de Möbius e o cilindro.

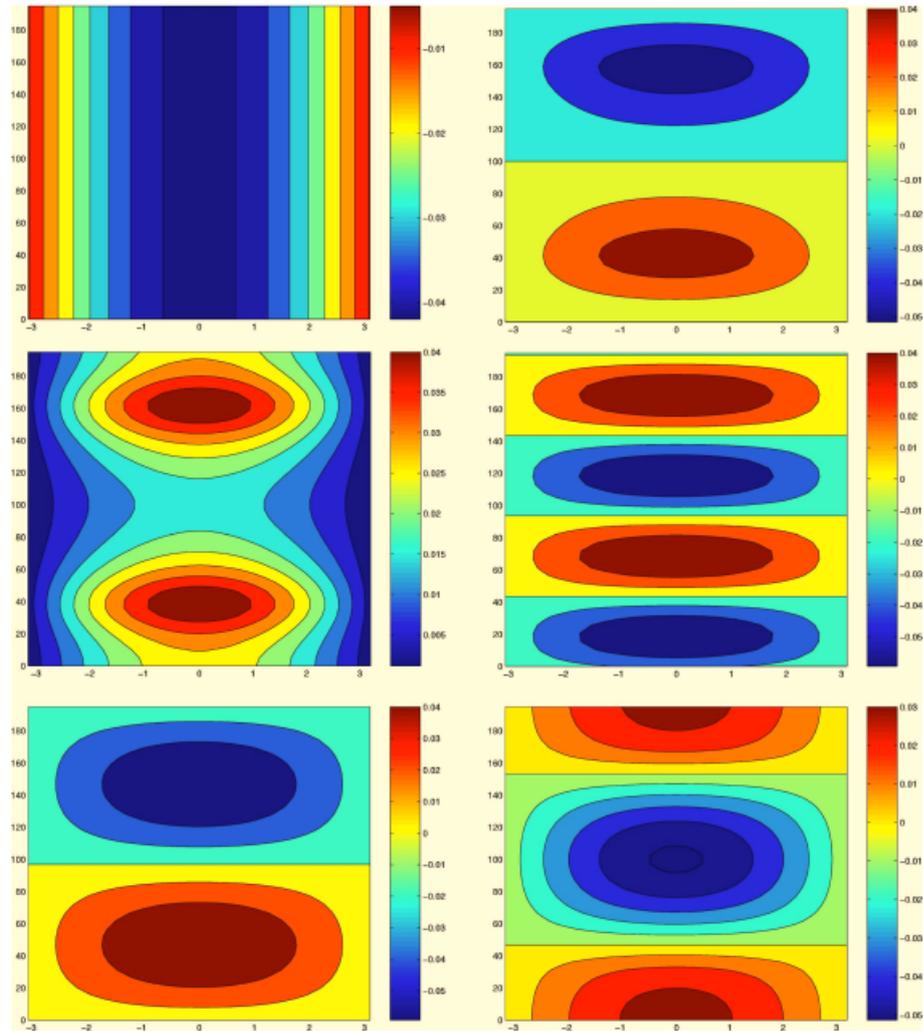


Figura 8 – Os três primeiros autoestados para o caso do problema de Möbius-plano (gráficos à esquerda). E os três primeiros autoestados para o caso da estrutura de Möbius (gráficos à direita) [4]

4 MECÂNICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA SEM SPIN NA FITA DE MÖBIUS.

Neste capítulo investigaremos a mecânica quântica de uma partícula sem spin na Fita de Möbius por meio da equação de Schrödinger. Analisaremos esse problema tanto intrinsicamente como extrinsecamente com o intuito de verificar o efeito de se incluir o efeito da curvatura na análise.

4.1 Equação de Schrödinger na Fita de Möbius

Se compararmos as equações (2.74) e (2.93) que tratam, respectivamente, da abordagem intrínseca e extrínseca, notamos que elas diferem entre si somente por um único termo. Esse termo é o potencial da Costa que como vimos se origina do processo de restrição usado para colocar a partícula sobre a superfície. Consideramos então a dinâmica de uma partícula sem spin restrita à fita de Möbius. Essa partícula será regida pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} g^{ij} \hat{P}_i \hat{P}_j + V_e + \kappa V_{dC}, \quad (4.1)$$

onde m é a massa da partícula, $\hat{P}_\mu = -i\hbar\nabla_\mu - e\mathbf{A}_\mu$ é o operador momento minimamente acoplado ao campo eletromagnético, ∇_μ é a derivada covariante, e V_e é o potencial eletrostático. O potencial V_{dC} é o potencial da Costa (2.94), ele está sendo multiplicado pelo número κ , que é definido como $\kappa = 1$ para o método extrínseco, e $\kappa = 0$ para o método intrínseco. Examinemos então cada caso particularmente.

4.1.1 Caso Intrínseco ($\kappa = 0$):

Segundo a abordagem intrínseca a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula na ausência de campos externos, em um sistema de coordenadas curvilíneas, será dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_\mu \left(\sqrt{g} g^{\mu\nu} \partial_\nu \psi \right) = E\psi. \quad (4.2)$$

Alternativamente, podemos calcular o Laplaciano da equação de Schrödinger escrevendo $\nabla^2 = \nabla^i \nabla_i$, onde $\nabla_i V^j = \partial_i V^j + \Gamma_{ik}^j V^k$, ficamos então com a seguinte equação:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} g^{ij} [\partial_i \partial_j \psi - \Gamma_{ij}^k \partial_k \psi] = E\psi. \quad (4.3)$$

Podemos escrever a equação de Schrödinger da fita de Möbius se substituindo os símbolos de Christoffel, dados pelas equações (3.9), (3.10) e (3.11), no segundo termo da equação (4.3).

Fazendo isso temos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \partial_u^2 \psi + \frac{1}{\beta^2} [\partial_\theta^2 \psi + \beta \partial_u \beta \partial_u \psi - \frac{\partial_\theta \beta}{\beta} \partial_\theta \psi] \right\} = E \psi. \quad (4.4)$$

Definindo $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$ a equação (4.4) pode ser escrita como:

$$-\partial_u^2 \psi - \frac{1}{\beta^2} [\partial_\theta^2 \psi + \beta \partial_u \beta \partial_u \psi] - \frac{\partial_\theta \beta}{\beta} \partial_\theta \psi = \varepsilon \psi. \quad (4.5)$$

Como vimos na secção 3.2, devido a geometria da fita de Möbius o momento angular da partícula não é conservado, e consequentemente, a função de onda não pode ser separada. Isso significa que não podemos escrever $\Psi(u, \theta) = \phi(u)\psi(\theta)$, isso tornaria nosso trabalho bem mais simples. Contudo, podemos fixar uma das variáveis e resolver a equação de Schrödinger para a outra variável. Por exemplo, fixando $u = u_0$, temos uma partícula percorrendo um caminho em torno da fita de Möbius, com θ variando de 0 até 2π . Já se fixarmos θ , a partícula percorre uma trajetória na largura da fita, com u indo de $-L$ até L .

Fixando então a variável u , obtemos a seguinte equação com $\psi = \psi(\theta)$

$$-\frac{1}{\beta^2} \psi'' + \frac{\beta'}{\beta^3} \psi' = \varepsilon \psi, \quad (4.6)$$

onde $\psi' = \frac{d\psi}{d\theta}$. A equação (4.6) não possui a forma exata da equação de Schrödinger, pois como podemos ver o primeiro termo é multiplicado por $1/\beta^2$, e o segundo termo da equação depende da derivada primeira da função de onda. Resolveremos essa inconveniência realizando uma mudança na variável angular θ . Suponhamos que exista duas funções: $v = v(\theta)$ e $A = A(\theta)$ tais que

$$v' = \frac{dv}{d\theta} = A(\theta). \quad (4.7)$$

Logo,

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dv}{d\theta} \frac{d}{dv} \Rightarrow \psi' = \frac{d\psi}{d\theta} = A \psi', \quad (4.8)$$

onde $\psi = \frac{d\psi}{dv}$. Consequentemente, temos que

$$\psi'' = \frac{d}{d\theta}(A \psi') = A^2 \psi + A' \psi'. \quad (4.9)$$

Portanto,

$$-\frac{1}{\beta^2} \psi'' + \frac{\beta'}{\beta^3} \psi' = -\left(\frac{A}{\beta}\right)^2 \psi - \frac{A'}{\beta^2} \psi + \frac{\beta'}{\beta^3} A \psi. \quad (4.10)$$

Se escolhermos $A = \beta$ obtemos que

$$-\frac{1}{\beta^2} \psi''(\theta) + \frac{\beta'}{\beta^3} \psi'(\theta) = -\psi(v). \quad (4.11)$$

A equação (4.6) se torna então igual a

$$-\psi(v) = \varepsilon \psi(v) \quad (4.12)$$

Pela equação (4.7) a derivada de $v(\theta)$ em relação de θ será igual a

$$\frac{dv(\theta)}{d\theta} = \beta(\theta). \quad (4.13)$$

Por exemplo, para uma partícula movendo-se no raio interno da fita temos que $u = 0$, sendo assim

$$v(\theta) = \int_0^{2\pi} a d\theta = 2\pi a, \quad (4.14)$$

pois $\beta(\theta, u = 0) = a$. Neste caso $v(\theta)$ é igual ao comprimento do raio interno da fita. Portanto, o significado de $v(\theta)$ é que ele será igual ao comprimento do círculo descrito pela partícula.

Agora, se fixarmos a variável θ a equação (4.5) se torna igual a,

$$-\psi''(u) - \frac{\beta'}{\beta} \psi'(u) = \varepsilon \psi(u). \quad (4.15)$$

Como podemos observar a equação (4.13) possui semelhança com a equação de Schrödinger independente do tempo, a não ser pelo segundo termo que é dependente da derivada primeira da função de onda. Consequentemente obtemos um Hamiltoniano não hermitiano:

$$H_{\theta_0} = \frac{1}{2m} P_u^2 - \frac{\beta'}{\beta} \frac{i\hbar}{2m} P_u, \quad (4.16)$$

onde $P_u = -i\hbar \frac{d}{du}$. Como podemos ver esse Hamiltoniano é não hermitiano, porém ele preserva a simetria PT. Tal como fizemos na página 37, podemos obter um Hamiltoniano hermitiano equivalente escrevendo a função de onda $\psi(u)$ como:

$$\psi(u) = B(u) \xi(u), \quad (4.17)$$

onde $\xi(u)$ é uma função de onda que obedece a equação de Schödinger, e B é uma função de u a ser determinada de tal modo que eliminemos os termos dependentes de $\xi'(u)$. Sendo assim,

$$\psi'(u) = B'\xi + B\xi' \quad \Rightarrow \quad \psi''(u) = B''\xi + B\xi'' + 2B'\xi' \quad (4.18)$$

Substituindo isso na equação (4.15), e após dividir a equação por B , obtemos que

$$-\xi''(u) + \frac{B''}{B}\xi(u) + \left[2\frac{B'}{B} - \frac{\beta'}{\beta}\right]\xi' - \frac{B'\beta'}{B\beta}\xi(u) = \varepsilon\xi(u), \quad (4.19)$$

Agora, se escolhermos que

$$2\frac{B'}{B} - \frac{\beta'}{\beta} = 0, \quad (4.20)$$

teremos que,

$$\frac{B'}{B} = \frac{\beta'}{2\beta}. \quad (4.21)$$

Consequentemente,

$$\frac{B''}{B} = \left(\frac{\beta'}{\beta}\right)^2 + \left(\frac{\beta'}{2\beta}\right)'. \quad (4.22)$$

Substituindo (4.21) e (4.22) em (4.17), obtemos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\xi''(u) + V(u)\xi(u) = \varepsilon\xi(u), \quad (4.23)$$

onde,

$$V(u) = -\frac{3}{4}\left(\frac{\partial_u\beta}{2\beta}\right)^2 - \left(\frac{\partial_u\beta}{2\beta}\right)'. \quad (4.24)$$

4.1.2 Caso Extrínseco ($\kappa = 1$):

Para examinarmos o problema extrinsecamente devemos incluir o potencial da Costa dado pela equação (2.94) nas equações (4.12) e (4.24). O potencial da Costa na fita de Möbius é calculado tomado os valores da curvatura média e gaussiana dados em (3.14) e (3.15), respectivamente.

Representamos o potencial da Costa na figura 9 para valores fixos de u e de θ .

Portanto, as equações (4.12) e (4.21), se tornam iguais a:

$$-\ddot{\phi}(v) + U_{eff}(v)\phi(v) = \varepsilon\phi(\theta), \quad (4.25)$$

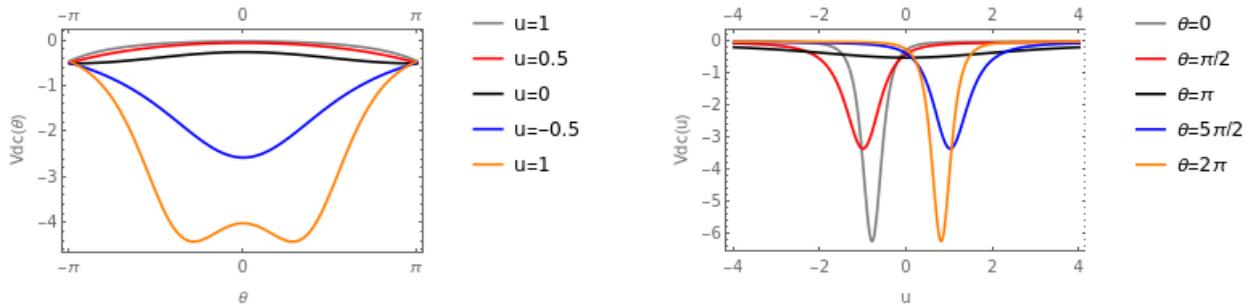


Figura 9 – Potencial da Costa para uma fita de Möbius de raio interno $a = 1m$, para valores de u fixo (gráfico à esquerda) com $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e para valores de θ fixo (gráfico à direita), com $-4 < u < 4$.

$$-\xi''(u) + U_{eff}(u)\xi(u) = \varepsilon\xi(u), \quad (4.26)$$

aonde os potenciais efetivos são dados por:

$$U_{eff}(v) = -(H^2(v) - K(v)), \quad (4.27)$$

$$U_{eff}(u) = -\frac{3}{4}\left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta}\right)^2 - \left(\frac{\partial_u \beta}{2\beta}\right)' - (H^2 - K). \quad (4.28)$$

Nas figuras 10 e 11 temos os potenciais efetivos obtidos para valores fixos de θ . Percebe-se que neste caso não existe simetria no potencial, exceto para $\theta_0 = \pi$. Percebe-se também que o potencial (4.24) (abordagem intrínseca) possui um comportamento parabólico para valores de θ_0 diferentes de π . Porém o potencial (4.28) (abordagem extrínseca), possui poços potenciais localizados para todos valores de θ_0 diferente de π . Contudo, o comportamento parabólico do potencial efetivo (4.24) continua presente no potencial efetivo obtido da abordagem extrínseca, para valores de u distantes dos poços potenciais. Portanto, o efeito que a curvatura extrínseca gera na dinâmica da partícula que se move ao longo da largura da fita, é o de restringir o movimento da partícula nos pontos aonde existe poços potenciais. É interessante notar que a forma do potencial para um determinado θ_0 , se repete em $\theta_0 + 2\pi$, porém o potencial é deslocado para a direita. Comparando os potenciais efetivos com o potencial da Costa (Figura 9), notamos que o comportamento dos potenciais efetivos é dominado pelo potencial da Costa, gerando poços potenciais nas regiões aonde a curvatura é maior, podemos esperar que nesses pontos sejam observados estados ligados de partículas na fita de Möbius.

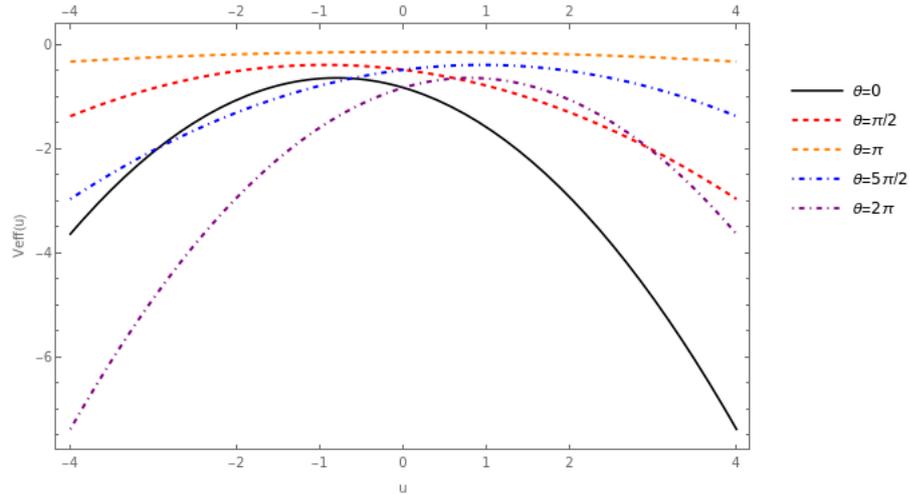


Figura 10 – Potencial efetivo (4.24) para determinados valores de θ no intervalo de -4 a 4 .

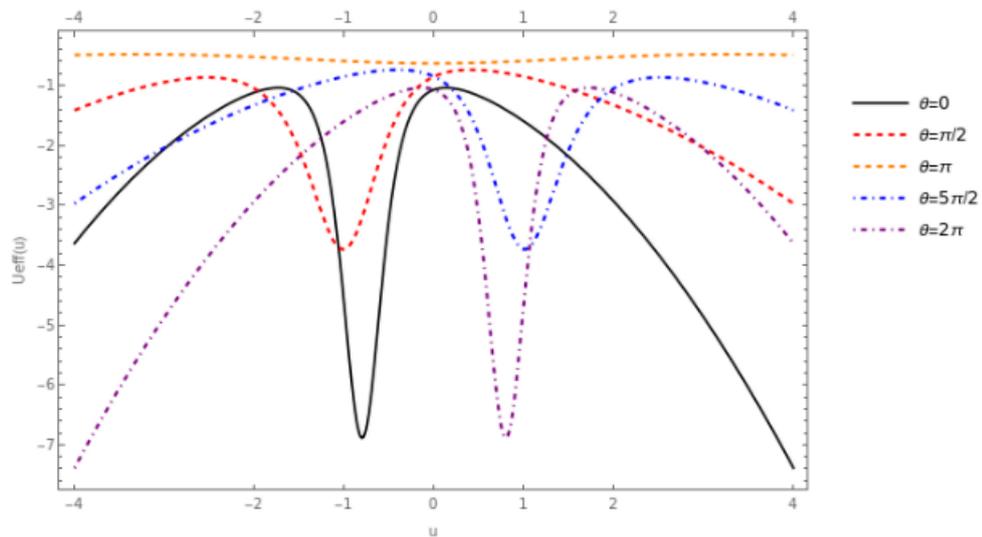


Figura 11 – Potencial efetivo (4.28) para determinados valores de θ no intervalo de -4 a 4 .

4.2 Solução da Função de Onda Para Valores Fixos de u_0 .

Nossa intenção agora é obter a função de onda e o espectro de energia de uma partícula sem spin na fita de Möbius para valores fixos da variável u . Faremos isso primeiramente para o caso intrínseco, (4.12) e posteriormente para o caso extrínseco, particularmente para o caso em que a partícula se move no centro da fita ($u = 0$).

Adotaremos as seguintes condições de contorno para uma fita de Möbius, de comprimento L , e de largura $2w$:

$$\begin{cases} \psi(v) = \psi(v + 2L), \\ \xi(w) = \xi(-w) = 0. \end{cases} \quad (4.29)$$

A primeira das condições de contorno vem do fato de que em uma fita de Möbius real uma

partícula só retorna a sua posição original depois de completar duas voltas completas em torno da fita. E a segunda condição de contorno determina que a função de onda seja definida somente sobre a fita de Möbius.

Podemos escrever a equação (4.12) como:

$$\ddot{\psi}(v) + k^2 \psi(v) = 0, \quad (4.30)$$

onde $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Uma solução para essa equação seria:

$$\psi(v) = C e^{\pm i k v}, \quad (4.31)$$

onde C é uma constante a ser determinada. Aplicando a primeira condição de contorno (4.29), na função de onda dado pela equação anterior, temos que

$$e^{ik(2L+v)} = e^{ik(v)} \Rightarrow e^{(2Lki)} = 1.$$

Podemos escrever isso como

$$e^{i[2kL]} = 1. \quad (4.32)$$

A equação (4.30) será satisfeita somente se $2kL = 2n\pi$, onde n é um número inteiro, portanto temos que

$$k = n \frac{\pi}{L} \quad (4.33)$$

O espectro de energia da partícula é dado por:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (4.34)$$

A função de onda deve ser normalizada, determinamos a condição de normalização pela seguinte equação:

$$\int_0^{2L} |\psi(v)|^2 dv = 1, \quad (4.35)$$

consequentemente a função de onda é dada por:

$$\psi(v) = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{in\pi v/L}. \quad (4.36)$$

Na tabela 1 mostramos o espectro de energia dos quatro primeiros estados de energia de um elétron na fita de Möbius. As funções de onda dos 4 primeiros autoestados, para n inteiro estão representados na figura (12). Representamos também o quadrado do modulo das funções de onda na figura (13).

Tabela 1 – Espectro de energia (4.32) para um elétron ($m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{Kg}$) em uma fita de Möbius de comprimento $L = 1 \text{nm}$.

Estado	$E_n(\text{eV})$
n=0	0
n=1	0,376
n=2	1,503
n=3	3,383
n=4	6,016

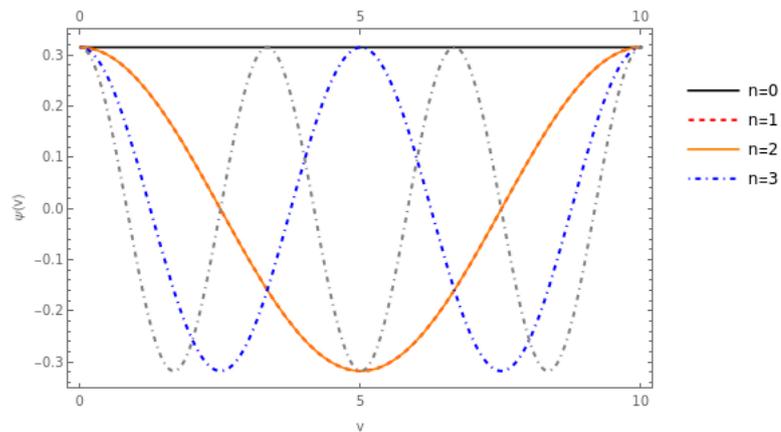


Figura 12 – Função de onda (4.34), para $L = 5$, com valores de n inteiro.

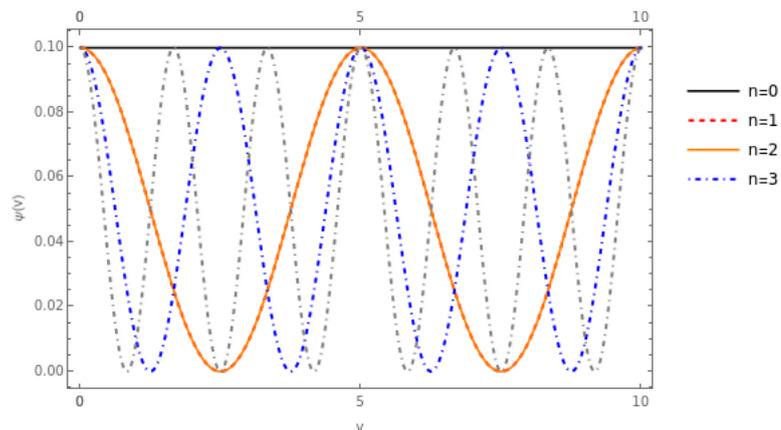


Figura 13 – Quadrado da função de onda (4.36), com $L = 5$, para valores de n inteiro.

Voltemos nossa atenção para o caso extrínseco. A equação (4.6), assim como a equação (4.15), nos conduz a um hamiltoniano não hermitiano. Porém, se escrevermos a função de onda como $\psi(\theta) = A(\theta)\phi(\theta)$, obtemos a seguinte equação do tipo equação de Schrödinger :

$$-\frac{1}{\beta^2}\phi(\theta)'' + \left[-\frac{1}{\beta^2}\left(\frac{\partial\theta\beta}{2\beta}\right)' + \frac{1}{4}\left(\frac{\partial\theta\beta}{2\beta}\right)^2 - (H^2 - K) \right]\phi(\theta) = \varepsilon\phi(\theta). \quad (4.37)$$

onde $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$. O primeiro termo está sendo dividido por $\beta^2(\theta)$, o que não é próprio da equação de Schrödinger. Contudo, quando $u = 0$, $\beta(\theta)$ se reduz ao raio interno da fita: “ a ”. Nesse caso estamos examinando o movimento de uma partícula no centro da fita de Möbius. Para $u = 0$, a equação (4.37) se torna igual a

$$-\frac{1}{a^2}\phi''(\theta) + \left[-\frac{1}{4a^2}\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} - \frac{1}{4a^2} \right]\phi(\theta) = \varepsilon\phi(\theta). \quad (4.38)$$

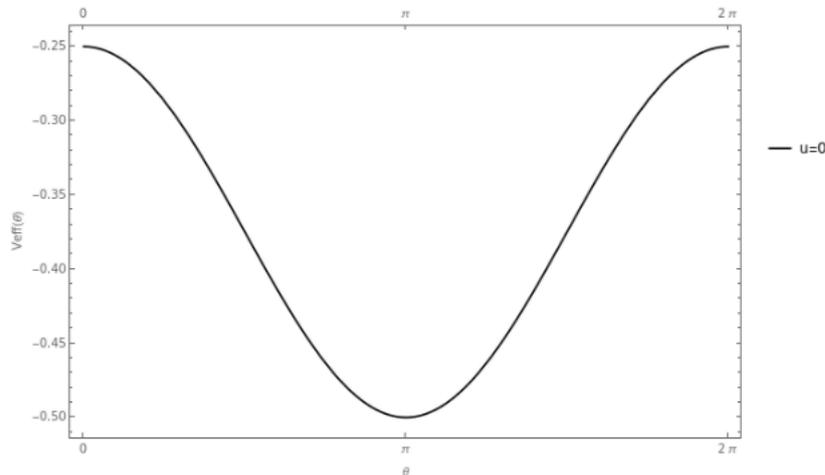


Figura 14 – Potencial efetivo da equação (4.35), para $u = 0$, e raio interno parametrizado como $a = 1$.

Podemos escrever essa equação como:

$$\frac{d^2\phi(\theta)}{d\theta^2} + \left[\frac{1}{4}\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} + a^2\varepsilon \right]\phi(\theta) = 0. \quad (4.39)$$

Mas,

$$\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1 - \text{Cos}\theta), \quad (4.40)$$

portanto, temos que

$$\frac{d^2\phi(\theta)}{d\theta^2} + \left[\frac{1}{8}(1 - \text{Cos}\theta) + \frac{1}{4} + a^2\varepsilon \right]\phi(\theta) = 0, \quad (4.41)$$

ou seja,

$$\frac{d^2\phi(\theta)}{d\theta^2} + \left[\frac{3}{8} + a^2\varepsilon - \frac{1}{8}\text{Cos}\theta \right]\phi(\theta) = 0. \quad (4.42)$$

Usando a partir de agora a variável $x = \frac{1}{2}\theta$,

$$\frac{1}{4} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \left[\frac{3}{8} + a^2\varepsilon - \frac{1}{8}\text{Cos}(2x) \right] \phi(x) = 0. \quad (4.43)$$

Obtemos então a seguinte equação:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + [b - 2q\text{Cos}(2x)]\phi(x) = 0, \quad (4.44)$$

onde,

$$\begin{cases} b = \frac{3}{2} + 4a^2\varepsilon, \\ q = \frac{1}{4}. \end{cases} \quad (4.45)$$

A equação (4.44) tem a mesma forma que a equação de Mathieu [53]:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + (b - 2q\text{Cos } 2x)y = 0, \quad (4.46)$$

onde b e q são parâmetros. Desse modo esperamos que as soluções da equação de Mathieu seja também soluções da equação (4.38). O problema do pêndulo quântico também nos leva a uma equação de Mathieu, aonde as soluções encontradas para esse problema são funções de Mathieu [54]. Usaremos novamente a primeira condição de condição de contorno (4.29), mas agora $\theta = 2x$, então:

$$\phi(2x + 4\pi) = \phi(2x)$$

ou seja,

$$\phi(2[x + 2\pi]) = \phi(2x), \quad (4.47)$$

portanto nossa solução será periódica em 2π . A equação de Mathieu (4.46) possui soluções de índice par denotadas por $Ce_{2m}(a_{2m}, q, x)$ e $Se_{2m}(b_{2m}, q, x)$, $m = 1, 2, 3, \dots$, periódicas em π , e soluções de índice ímpar denotadas por $Ce_{2m+1}(a_{2m+1}, q, x)$ e $Se_{2m+1}(b_{2m+1}, q, x)$, $m = 1, 2, 3, \dots$, periódicas em 2π [55]. Logo esperamos que as soluções de índice ímpar sejam as soluções corretas para o nosso problema.

O espectro de energia da partícula está relacionado com os parâmetro a_{2m+1} ou b_{2m+1} , dados pela equação (4.45) e que são chamados de valores característicos. Podemos então escrever que

$$E_{C_r} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \left(C_r - \frac{3}{2} \right), \quad (4.48)$$

onde $C_r = a_{2m+1}$ ou $C_r = b_{2m+1}$. Para obtermos o espectro precisamos encontrar os valores característico correspondentes para um determinado valor de q . Para essa análise usaremos os recursos disponíveis no software Mathematica. Nele as funções de Mathieu $Se_r(b_r, q, x)$, são determinadas por $MathieuS[b, q, z]$, [56] onde o valor característico b para um determinado valor de q é dado pela função $MathieuCharacteristicB[r, q]$, sendo r um número inteiro ou racional. Por sua vez as funções de Mathieu $Ce_r(a_r, q, x)$ são determinadas por $MathieuC[a, q, z]$, aonde o valor característico a para um determinado valor de q é dado pela função $MathieuCharacteristicA[r, q]$.

As funções ímpares Mathieu não aceitam $r = 0$, então escrevemos r como $r = 2m + 1$, onde $m = 1, 2, 3, \dots$. Para as funções ímpares de Mathieu temos também a seguinte propriedade: $MathieuCharacteristicB[-r, q] = MathieuCharacteristicB[r, q]$. Na tabela 2 representamos o espectro de energia para um elétron na fita de Möbius.

Tabela 2 – Espectro de energia para um elétron ($m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{Kg}$) em uma fita de Möbius de raio interno $a = 1 \text{nm}$.

m	$E_m(\text{meV})$
m=0	$\begin{cases} E_{a_1} = -2,45 \\ E_{b_1} = -7,21 \end{cases}$
m=1	$\begin{cases} E_{a_3} = 71,47 \\ E_{b_3} = 71,47 \end{cases}$
m=2	$\begin{cases} E_{a_5} = 223,87 \\ E_{b_5} = 223,87 \end{cases}$
m=3	$\begin{cases} E_{a_7} = 452,40 \\ E_{b_7} = 452,40 \end{cases}$
m=4	$\begin{cases} E_{a_9} = 757,17 \\ E_{b_9} = 757,17 \end{cases}$

Portanto, esperamos que as funções de Mathieu $\{Ce_{2m+1}(q, x), Se_{2m+1}(q, x)\}$ sejam soluções independentes do nosso problema. No intervalo $[0, 2\pi]$, as funções de Mathieu são

normalizadas por $\sqrt{\pi}$ [55], temos portanto duas soluções normalizadas:

$$\begin{cases} \phi_{2m+1}^{(par)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} C e_{2m+1}(q, x), \\ \phi_{2m+1}^{(impar)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} S e_{2m+1}(q, x). \end{cases} \quad (4.49)$$

A solução completa do nosso problema portanto é:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} [C e_{2m+1}(q, x) + S e_{2m+1}(q, x)]. \quad (4.50)$$

Nas figuras (15) e (16) representamos, respectivamente, a função de onda e seu modulo ao quadrado, com $q = 1/16a^2$, e b_r e a_r com $r = 2m + 1$, aonde m é um inteiro.

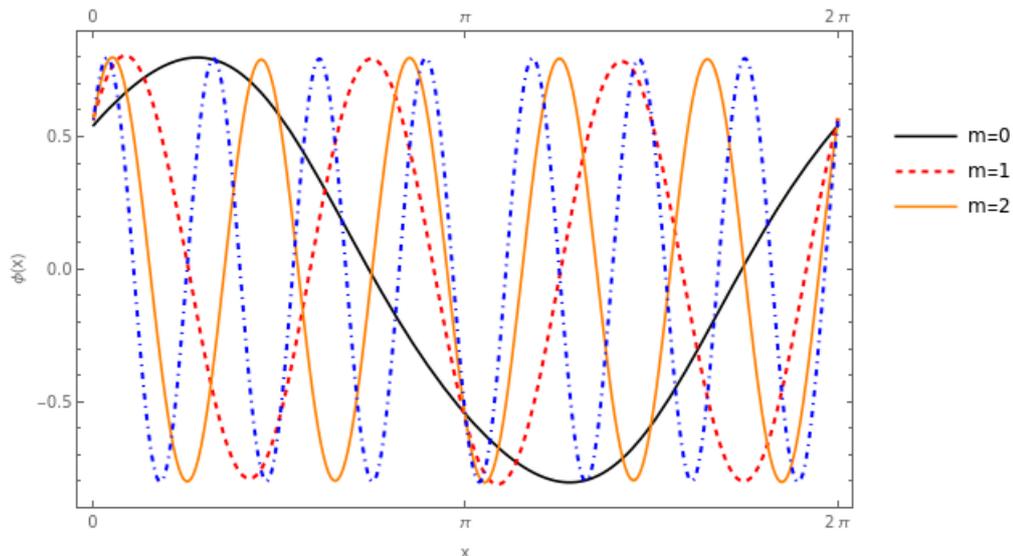


Figura 15 – Função de onda (4.48) para valores de m inteiros.

Concluimos portanto que no caso extrínseco, consideramos somente o caso em que $u = 0$, a curvatura induz o aparecimento de um potencial periódico, e a equação que rege o movimento da partícula é do tipo pêndulo quântico. A partícula parece oscilar em torno de $\theta = \pi$. O caso $u = 0$, também pode ser visto como um caso limite em que o raio interno é muito maior do que a largura da fita, fazendo com que $\beta(u, \theta) \rightarrow a$.

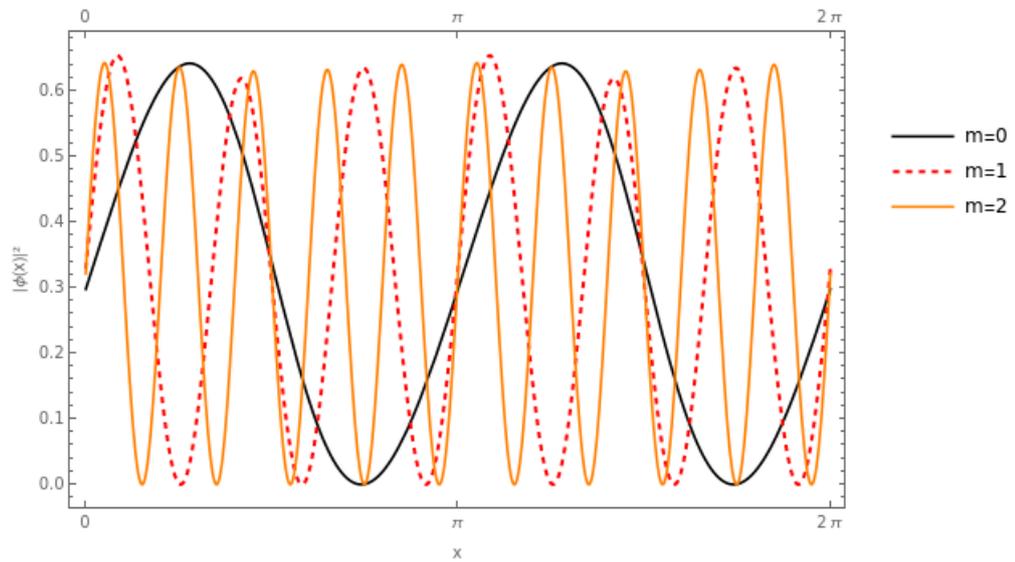


Figura 16 – Função de onda (4.48) ao quadrado para valores de m inteiros .

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho, abordamos os formalismos desenvolvidos no estudo da mecânica quântica em superfícies bidimensionais, imersas no espaço tridimensional euclidiano. Aplicamos as abordagens intrínseca e extrínseca na análise da dinâmica quântica de uma partícula sem spin na superfície de uma fita de Möbius. Realizamos isso fixando uma das duas coordenadas da partícula sobre a superfície, obtemos então uma partícula que se move em um anel em torno da fita de Möbius, ou uma partícula que se move em uma trajetória unidimensional ao longo da largura da fita. Obtemos Hamiltonianos efetivos simétricos em relação a paridade, e a reversão temporal, porém que não são hermitianos. Realizamos então uma modificação na função de onda e obtemos Hamiltonianos hermitianos equivalentes. Inicialmente consideramos somente a influência da curvatura intrínseca, ao modificarmos o Laplaciano da equação de Schrödinger, e posteriormente incluímos a curvatura extrínseca ao inserir o potencial da Costa. Comparamos os resultados obtidos em ambas as abordagens, com o objetivo de entender a contribuição da geometria intrínseca da superfície no Hamiltoniano efetivo, e o efeito obtido ao se incluir a curvatura extrínseca no Hamiltoniano. Obtemos então que na abordagem intrínseca, a curvatura contribui com o Hamiltoniano gerando potenciais efetivos, que para determinados valores das coordenadas podem ser tanto atrativos como repulsivos. Na abordagem extrínseca, verificamos que os potenciais efetivos são dominados pelo potencial da Costa, gerando barreiras de potencial constantes, ou poços potenciais. Os potenciais obtidos na abordagem extrínseca são todos atrativos. Portanto, a curvatura extrínseca contribui com a restrição da partícula em determinadas áreas da fita de Möbius, aonde acreditamos que se formem estados ligados.

Obtemos soluções da função de onda para o caso em que $u = u_0$, ou seja, para uma partícula que descreve um círculo em torno da função de onda. Na abordagem intrínseca, modificamos a variável angular θ para uma nova variável angular ν , e obtemos uma equação de Schrödinger para uma partícula livre. Obtemos a função de onda normalizada e o espectro de energia. Já na abordagem extrínseca, obtemos um sistema bastante interessante para o caso em que $u_0 = 0$, caso em que uma partícula se move no centro da fita de Möbius. Nestas circunstâncias o potencial que age sobre a partícula é periódico, semelhante ao caso do pêndulo quântico. As soluções obtidas são as funções de Mathieu periódicas em 2π .

Como perspectivas futuras para essa dissertação, ou para outros trabalhos relacionados, pontuamos as seguintes extensões que desejamos realizar em breve:

- Obter as soluções do caso extrínseco, para valores fixos de u , quando $u_0 \neq 0$.

- Obter as soluções para o caso em que θ é fixo, ou seja, examinar a dinâmica de uma partícula na direção transversal da fita de Möbius, que sofre a ação do potencial (4.24), no caso intrínseco, ou do potencial (4.28), no caso extrínseco. Adotaremos a segunda condição de contorno de (4.29).
- Estudar as propriedades eletrônicas de uma fita de Möbius feita de grafeno: Uma aplicação natural da abordagem desenvolvida neste trabalho, seria a investigação do comportamento de elétrons em uma fita de grafeno, dotada de uma geometria do tipo da fita de Möbius. Investigações semelhantes tem sido realizadas para outras superfícies, como por exemplo o toro, a catenoide, a helicóide, entre outras [57, 58, 59].
- Incluir a ação de campos eletromagnéticos: O cenário de da Costa já foi estendido para partículas carregadas sobre a ação do campo elétrico e magnético [60]. Podemos considerar a existência de um campo elétrico ou magnético constante em uma determinada direção do espaço. Como por exemplo, se supormos que na direção z existe um campo elétrico constante $\vec{E} = E\hat{k}$, podemos calcular a componente paralela do campo elétrico à superfície da fita de Möbius. Semelhantemente, se supormos a existência de um campo magnético $\vec{B} = B\hat{k}$ o vetor potencial \vec{A} terá a forma $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$. Podemos incluir a contribuição desses potenciais efetivos e analisar o efeito sobre a função de onda da partícula.

REFERÊNCIAS

- 1 NETO, A. H. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, v. 81, n. 1, p. 109–162, 2009.
- 2 MAZHARIMOUSAVI, S. H. Quantum particle on a surface: Catenary surface and paraboloid of revolution. **arXiv preprint arXiv:2107.05621**, 2021.
- 3 WEISSTEIN, E. W. Möbius strip. <https://mathworld.wolfram.com/>, Wolfram Research, Inc., 2001.
- 4 GRAVESEN, J.; WILLATZEN, M. Eigenstates of möbius nanostructures including curvature effects. **Physical Review A**, APS, v. 72, n. 3, p. 032108, 2005.
- 5 DIRAC, P. A. M. **Lectures on quantum mechanics**. [S.l.]: Courier Corporation, 2001. v. 2.
- 6 WEINBERG, S. Lectures on quantum mechanics. In: . [S.l.: s.n.], 2015.
- 7 DEWITT, B. S. Dynamical theory in curved spaces. i. a review of the classical and quantum action principles. **Reviews of modern physics**, APS, v. 29, n. 3, p. 377, 1957.
- 8 CHENG, K. Quantization of a general dynamical system by feynman’s path integration formulation. **Journal of Mathematical Physics**, American Institute of Physics, v. 13, n. 11, p. 1723–1726, 1972.
- 9 JENSEN, H.; KOPPE, H. Quantum mechanics with constraints. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 63, n. 2, p. 586–591, 1971.
- 10 COSTA, R. D. Quantum mechanics of a constrained particle. **Physical Review A**, APS, v. 23, n. 4, p. 1982, 1981.
- 11 NABUTOVSKII, V.; ROMANOV, D. Electron states near a curved interface. **Zh. Eksp. Teor. Fiz.**, v. 90, p. 232–239, 1986.
- 12 OGAWA, N.; FUJII, K.; KOBUSHUKIN, A. Quantum mechanics in riemannian manifold. **Progress of theoretical physics**, Oxford University Press, v. 83, n. 5, p. 894–905, 1990.
- 13 IKEGAMI, M.; NAGAOKA, Y.; TAKAGI, S.; TANZAWA, T. Quantum mechanics of a particle on a curved surface: comparison of three different approaches. **Progress of theoretical physics**, Oxford University Press, v. 88, n. 2, p. 229–249, 1992.
- 14 NAKAMURA, M.; MINOWA, H. Quantum theory on a curved space. **Il Nuovo Cimento B (1971-1996)**, Springer, v. 108, n. 10, p. 1181–1190, 1993.
- 15 NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.-e.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- 16 KATSNELSON, M. I. Graphene: carbon in two dimensions. **Materials today**, Elsevier, v. 10, n. 1-2, p. 20–27, 2007.
- 17 NETO, A. C. Les houches notes on graphene. **arXiv preprint arXiv:1004.3682**, 2010.

- 18 NETO, A. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M. Drawing conclusions from graphene. **Physics world**, IOP Publishing, v. 19, n. 11, p. 33, 2006.
- 19 FURTADO, C.; MORAES, F.; CARVALHO, A. d. M. Geometric phases in graphitic cones. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 372, n. 32, p. 5368–5371, 2008.
- 20 ATANASOV, V.; SAXENA, A. Helicoidal graphene nanoribbons: Chiraltronics. **Physical Review B**, APS, v. 92, n. 3, p. 035440, 2015.
- 21 GUINEA, F.; GEIM, A. K.; KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S. Generating quantizing pseudomagnetic fields by bending graphene ribbons. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 035408, Jan 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.035408>>.
- 22 BERBER, S.; KWON, Y.-K.; TOMÁNEK, D. Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes. **Physical review letters**, APS, v. 84, n. 20, p. 4613, 2000.
- 23 CARVALHO, A.; WANG, M.; ZHU, X.; RODIN, A. S.; SU, H.; NETO, A. H. C. Phosphorene: from theory to applications. **Nature Reviews Materials**, Nature Publishing Group, v. 1, n. 11, p. 1–16, 2016.
- 24 NAKADA, K.; FUJITA, M.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. **Physical Review B**, APS, v. 54, n. 24, p. 17954, 1996.
- 25 RUSSO, S.; OOSTINGA, J. B.; WEHENKEL, D.; HEERSCHKE, H. B.; SOBHANI, S. S.; VANDERSYPEN, L. M.; MORPURGO, A. F. Observation of aharonov-bohm conductance oscillations in a graphene ring. **Physical Review B**, APS, v. 77, n. 8, p. 085413, 2008.
- 26 YAKUBO, K.; AVISHAI, Y.; COHEN, D. Persistent currents in möbius strips. **Physical Review B**, APS, v. 67, n. 12, p. 125319, 2003.
- 27 LI, Z.; RAM-MOHAN, L. Quantum mechanics on a möbius ring: Energy levels, symmetry, optical transitions, and level splitting in a magnetic field. **Physical Review B**, APS, v. 85, n. 19, p. 195438, 2012.
- 28 MILIORDOS, E. Particle in a möbius wire and half-integer orbital angular momentum. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 6, p. 062107, 2011.
- 29 MILIORDOS, E. Hückel versus möbius aromaticity: The particle in a cylinder versus a möbius strip. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 6, p. 062118, 2010.
- 30 SOUZA, J. de; FURTADO, C. On the confinement of massless dirac fermions in topological möbius strips. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 30, n. 31, p. 1650224, 2016.
- 31 ZHAO, N.; DONG, H.; YANG, S.; SUN, C. Observable topological effects in molecular devices with möbius topology. **Physical Review B**, APS, v. 79, n. 12, p. 125440, 2009.
- 32 GUO, Z.; GONG, Z.; DONG, H.; SUN, C. Möbius graphene strip as a topological insulator. **Physical Review B**, APS, v. 80, n. 19, p. 195310, 2009.

- 33 WANG, X.; ZHENG, X.; NI, M.; ZOU, L.; ZENG, Z. Theoretical investigation of möbius strips formed from graphene. **Applied Physics Letters**, American Institute of Physics, v. 97, n. 12, p. 123103, 2010.
- 34 CAETANO, E. W.; FREIRE, V. N.; SANTOS, S. D.; GALVAO, D. S.; SATO, F. Möbius and twisted graphene nanoribbons: Stability, geometry, and electronic properties. **The Journal of chemical physics**, American Institute of Physics, v. 128, n. 16, p. 164719, 2008.
- 35 ZHANG, X.; TIAN, B.; ZHEN, W.; LI, Z.; WU, Y.; LU, G. Construction of möbius-strip-like graphene for highly efficient charge transfer and high active hydrogen evolution. **Journal of catalysis**, Elsevier, v. 354, p. 258–269, 2017.
- 36 YANG, K.; ZHANG, C.; ZHENG, X.; WANG, X.; ZENG, Z. The stability of graphene-based möbius strip with vacancy and at high-temperature. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 32, n. 31, p. 1850350, 2018.
- 37 TANDA, S.; TSUNETTA, T.; OKAJIMA, Y.; INAGAKI, K.; YAMAYA, K.; HATAKENAKA, N. A möbius strip of single crystals. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 417, n. 6887, p. 397–398, 2002.
- 38 COHEN-TANNOUJJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics. vol. 1. 4. rev. upd. 2009.
- 39 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. Modern quantum mechanics. 2-nd edition. **Person New International edition**, 2014.
- 40 GRAY, A.; ABBENA, E.; SALAMON, S. **Modern differential geometry of curves and surfaces with Mathematica®**. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2017.
- 41 STRUIK, D. J. **Lectures on classical differential geometry**. [S.l.]: Courier Corporation, 1961.
- 42 SÁNCHEZ, E. Cálculo tensorial. **Rio de Janeiro: Interciência**, 2011.
- 43 COSTA, R. D. Constraints in quantum mechanics. **Physical review A**, APS, v. 25, n. 6, p. 2893, 1982.
- 44 BENDER, C. M. Making sense of non-hermitian hamiltonians. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 70, n. 6, p. 947, 2007.
- 45 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having p t symmetry. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 24, p. 5243, 1998.
- 46 PICKOVER, C. A. **The Möbius Strip: Dr. August Möbius's Marvelous Band in Mathematics, Games, Literature, Art, Technology, and Cosmology**. [S.l.]: Basic Books, 2006.
- 47 SPIVAK, M. A comprehensive introduction to differential geometry, vol. i, 3rd edn. publish or perish. **Inc., Houston**, 1999.
- 48 SPIVAK, M. A comprehensive introduction to differential geometry, vol. iii, 3rd edn. publish or perish. **Inc., Houston**, 1999.
- 49 TAYLOR, J. R. **Mecânica clássica**. [S.l.]: Bookman Editora, 2013.

- 50 WATARI, K. **Mecânica Clássica 2**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2004. v. 2.
- 51 RAM-MOHAN, R.; RAM-MOHAN, L. R. **Finite element and boundary element applications in quantum mechanics**. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002. v. 5.
- 52 STAROSTIN, E.; HEIJDEN, G. V. D. The shape of a möbius strip. **Nature materials**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 8, p. 563–567, 2007.
- 53 ABRAMOWITZ, M. S.; STEGUN, I. Ia.(1964), handbook of mathematical functions. **Washington: National Bureau of Standards**, v. 923, 1999.
- 54 PRADHAN, T.; KHARE, A. Plane pendulum in quantum mechanics. **American Journal of Physics**, American Association of Physics Teachers, v. 41, n. 1, p. 59–66, 1973.
- 55 ALDROVANDI, R.; FERREIRA, P. L. Quantum pendulum. **American Journal of Physics**, American Association of Physics Teachers, v. 48, n. 8, p. 660–664, 1980.
- 56 WEISSTEIN, E. W. Mathieu function. <https://mathworld.wolfram.com/>, Wolfram Research, Inc., 2003.
- 57 SILVA, J. E. G.; FURTADO, J.; RAMOS, A. C. A. Electronic properties of a graphene nanotorus under the action of external fields. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 93, n. 12, p. 1–9, 2020.
- 58 SILVA, J.; FURTADO, J.; SANTIAGO, T.; RAMOS, A. C.; COSTA, D. da. Electronic properties of bilayer graphene catenoid bridge. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 384, n. 25, p. 126458, 2020.
- 59 GOMES, J.; MORAES, F.; TEIXEIRA, R. et al. Geometric effects on a quantum particle constrained to a helix, catenary, helicoid, or catenoid. **arXiv preprint arXiv:2103.00610**, 2021.
- 60 FERRARI, G.; CUOGHI, G. Schrödinger equation for a particle on a curved surface in an electric and magnetic field. **Physical review letters**, APS, v. 100, n. 23, p. 230403, 2008.