



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

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

EFEITOS DA CURVATURA LOCALIZADA NA DINAMICA DE FÉRMIONS DE DIRAC SEM MASSA
EM (2+1) DIMENSOES

FORTALEZA

2025

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

EFEITOS DA CURVATURA LOCALIZADA NA DINAMICA DE FÉRMIONS DE DIRAC SEM MASSA EM
(2+1) DIMENSOES

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

Orientador: Prof. Dr. Jose Euclides Gomes da Silva.

FORTALEZA
2025

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

- L696e Lima, Antônio Romário do Nascimento.
 Efeitos da curvatura localizada na dinâmica de férmions de Dirac sem massa (2+1) dimensões / Antônio Romário do Nascimento Lima. – 2025.
 98 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Ecologia e Recursos Naturais, Fortaleza, 2025.
 Orientação: Prof. Dr. Jose Euclides Gomes da Silva.
1. férmions. 2. equação de Dirac. 3. curvatura. 4. métrica. 5. grafeno. I. Título.

CDD 577

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

EFEITOS DA CURVATURA LOCALIZADA NA DINAMICA DE FÉRMIONS DE DIRAC SEM MASSA EM
(2+1) DIMENSOES

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

Aprovada em 22/08/2025.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Diego Franking de Souza Veras Santana
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

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

Aos meus pais, Antonio de Oliveira Lima e Antônia Valdelice Alves, e também aos meus irmãos, com todo meu amor e gratidão.

AGRADECIMENTOS

A Deus e à Santíssima Virgem Maria, por todas as graças concedidas, pelo amparo constante e por iluminar meu caminho nos momentos mais desafiadores.

Aos meus pais, Antônio de Oliveira Lima e Antônia Valdelice Alves do Nascimento, pelo amor incondicional, apoio incansável e pela força inspiradora com que enfrentaram, junto a mim, cada obstáculo ao longo dessa trajetória. Aos meus irmãos e demais familiares, pelo carinho, incentivo e compreensão.

Ao meu orientador, Prof. Dr. José Euclides Gomes da Silva, por sua orientação atenciosa, paciência e dedicação, não apenas durante a elaboração desta dissertação, mas também ao longo de toda minha formação acadêmica. Estendo minha gratidão a todos os professores com quem tive a honra de aprender e que, direta ou indiretamente, contribuíram para minha formação.

À Universidade Federal do Ceará (UFC), especialmente ao Departamento de Física, pelo ambiente acadêmico acolhedor e pela estrutura que proporcionou o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também ao corpo docente, discente, técnico e administrativo pelo suporte oferecido ao longo desses dois anos.

Ao Laboratório de Simulação de Sistemas Coerentes (LASSCO), pela acolhida e pela rica experiência proporcionada por meio de cursos, seminários, discussões e trocas intelectuais que foram fundamentais na minha formação.

Às agências de fomento que possibilitaram minha permanência na pós-graduação, em especial ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro durante esta etapa decisiva.

Aos amigos que caminharam comigo nessa jornada e, com sua amizade, apoio e parceria, tornaram esse percurso mais leve e significativo: Alana Carolina, Peter Stephen, Wellisson Lima, Erlando Aguiar, Victor Teixeira, Rufino Neto, Tiago Crispin, Felipe Ravi, Lúcio Sousa, Rian Fernandes e Ítalo Albuquerque. A cada um, meu sincero agradecimento.

”A física não é sobre como o mundo é, mas sobre o que podemos dizer sobre ele.”

Niels Bohr.

RESUMO

Neste trabalho, investigamos como uma curvatura localizada afeta a dinâmica de férmions de Dirac sem massa propagando-se em uma superfície curva. Utilizamos o grafeno como sistema físico de interesse, uma vez que, devido à sua estrutura cristalina, os elétrons nesse material se comportam efetivamente como partículas relativísticas sem massa em um espaço-tempo de $(2+1)$ dimensões, permitindo descrever sua dinâmica por meio da equação de Dirac. Consideramos saliências suaves em superfícies curvas com simetria axial, adotando dois modelos geométricos específicos: uma saliência do tipo gaussiana e outra do tipo vulcão. Ao incorporar o acoplamento mínimo entre o espinor e a geometria da superfície descrita por meio dos vielbeins e da conexão de Spin, estudamos o comportamento da função de onda sobre essas geometrias. Como a curvatura se anula assintoticamente, verificamos que os estados eletrônicos se comportam como ondas livres longe das saliências. Nas regiões com curvatura acentuada, entretanto, observa-se um aumento significativo na densidade de probabilidade de encontrar o elétron naquela região. Por fim, introduzimos um campo magnético externo para analisar as diferenças entre o pseudocampo de gauge induzido pela curvatura e os efeitos de um campo real, o que permite identificar o surgimento de estados ligados e a formação de níveis de Landau.

Palavras-chave: férmions; equação de Dirac; curvatura; métrica; grafeno.

ABSTRACT

In this work, we investigate how a localized curvature affects the dynamics of massless Dirac fermions propagating on a curved surface. We use graphene as the physical system of interest, since due to its crystalline structure, the electrons in this material effectively behave as massless relativistic particles in a (2+1)-dimensional spacetime, allowing their dynamics to be described by the Dirac equation. We consider smooth protrusions on curved surfaces with axial symmetry, adopting two specific geometric models: a Gaussian-type bump and a volcano-type bump. By incorporating the minimal coupling between the spinor and the geometry of the surface, described using vielbeins and the spin connection, we study the behavior of the wavefunction over these geometries. As the curvature vanishes asymptotically, we find that the electronic states behave like free waves far from the protrusions. However, in regions with pronounced curvature, there is a significant increase in the probability density of finding the electron in that region. Finally, we introduce an external magnetic field to analyze the differences between the curvature-induced pseudogauge field and the effects of a real field, which allows us to identify the emergence of bound states and the formation of Landau levels.

Keywords: fermions; Dirac equation; curvature; metric; graphene.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estrutura Hexagonal do Grafeno.	18
Figura 2 – A estrutura hexagonal com os vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e as duas sub-redes A e B.	19
Figura 3 – Conexão dada pelos vetores $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$, entre um átomo da sub-rede A e seus primeiros vizinhos.	20
Figura 4 – Estrutura hexagonal da rede recíproca do favo de mel gerada pelos vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2	21
Figura 5 – Primeira zona de Brillouin na rede recíproca do grafeno.	21
Figura 6 – Bandas de energia do grafeno mostradas na primeira zona de Brillouin.	22
Figura 7 – Representação dos cones de Dirac mostradas na primeira zona de Brillouin.	23
Figura 8 – Representação da Superfície Gaussiana.	35
Figura 9 – Representação da superfície em forma de vulcão discutida no texto.	39

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Escalar de curvatura para a saliência gaussiana.	36
Gráfico 2 – Comportamento do pseudopotencial de Gauge $A_\theta(r)$ para diferentes razões entre a amplitude A e o parâmetro de largura b da superfície gaussiana.	37
Gráfico 3 – Escalar de Ricci para a superfície do tipo vulcão.	40
Gráfico 4 – Pseudopotencial de Gauge $A_\theta(r)$ para diferentes razões entre a amplitude A e o parâmetro de largura b da superfície tipo vulcão.	41
Gráfico 5 – Gráfico da velocidade de Fermi efetiva para superfície gaussiana.	50
Gráfico 6 – Gráfico da velocidade de Fermi efetiva para superfície tipo vulcão.	51
Gráfico 7 – U_A^2 para diferentes valores de m	55
Gráfico 8 – U_B^2 para diferentes valores de m	55
Gráfico 9 – U_A para diferentes valores de m	56
Gráfico 10 – U_B para diferentes valores de m	56
Gráfico 11 – ψ_A para diferentes valores de m	58
Gráfico 12 – ψ_B para diferentes valores de m	59
Gráfico 13 – $ \psi_A ^2$ para diferentes valores de m	60
Gráfico 14 – $ \psi_B ^2$ para diferentes valores de m	60
Gráfico 15 – Comportamento de ψ_A^2 para diferentes valores de m	63
Gráfico 16 – Comportamento de ψ_B^2 para diferentes valores de m	63
Gráfico 17 – Densidade de probabilidade para ψ_A com diferentes valores de m	64
Gráfico 18 – Densidade de probabilidade para ψ_B com diferentes valores de m	64
Gráfico 19 – Potencial efetivo quadrático quando $m = -1/2$ (para ψ_A) e $m = 1/2$ (para ψ_B).	70
Gráfico 20 – Potencial efetivo quadrático quando $m = 1/2$ (para ψ_A) e $m = -1/2$ (para ψ_B).	70
Gráfico 21 – Potencial efetivo para ψ_A na presença de um campo B.	71
Gráfico 22 – Potencial efetivo para ψ_B na presença de um campo B.	71
Gráfico 23 – Níveis de Landau.	73
Gráfico 24 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = 1/2$ no caso da Gaussiana.	74
Gráfico 25 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = 1/2$ no caso da Gaussiana.	74
Gráfico 26 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = 1/2$ no caso do vulcão.	75
Gráfico 27 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = 1/2$ no caso do vulcão.	75
Gráfico 28 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = -1/2$ no caso da Gaussiana.	75
Gráfico 29 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = -1/2$ no caso da Gaussiana.	75
Gráfico 30 – A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = -1/2$ no caso do vulcão.	75

Gráfico 31 –A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = -1/2$ no caso do vulcão.	75
Gráfico 32 –Densidade de probabilidade total para $m = \frac{1}{2}$ no caso da Gaussiana.	76
Gráfico 33 –Densidade de probabilidade total para $m = -\frac{1}{2}$ no caso da Gaussiana.	76
Gráfico 34 –Densidade de probabilidade total para $m = \frac{1}{2}$ no caso da superfície tipo vulcão.	77
Gráfico 35 –Densidade de probabilidade total para $m = -\frac{1}{2}$ no caso da superfície tipo vulcão.	77

LISTA DE SÍMBOLOS

$\eta_{\mu\nu}$	Métrica do espaço de Minkowski
$g_{\mu\nu}$	Métrica do espaço curvo
$\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda}$	Símbolos de Christoffel
$R_{\mu\nu}$	Tensor de Ricci
e_{μ}^a	Vielbein (ou tetrada)
ω_{μ}^{ab}	Conexão de spin
Ω_{μ}	Matriz de conexão de spin
γ^a	Matrizes de Dirac
∇_{μ}	Derivada covariante
\hat{H}	Hamiltoniano de Dirac efetivo
ψ	Espinor de duas componentes
ψ_A, ψ_B	Componentes do espinor
χ_A, χ_B	Componentes modificadas do espinor
$\mu(r)$	Fator de fase geométrica
r	Coordenada radial
θ	Ângulo polar
m	Momento angular total na direção z
E	Energia
\hbar	Constante de Planck reduzida
$z(r)$	Perfil da superfície
A	Altura da deformação
b	Largura da deformação
α	Intensidade da curvatura
$f(r)$	Modulação radial da curvatura
$F(r)$	Fator de deformação radial
A_{θ}	Pseudo-potencial de gauge
B	Campo magnético externo

LISTA DE SIGLAS

CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
STM	Microscopia de Varredura por Tunelamento
TEM	Microscopia Eletrônica de Transmissão
ZB	Zona de Brilloin

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
2	INTRODUÇÃO AO GRAFENO	18
2.1	Vetores de rede	18
2.2	Energias de banda no grafeno	20
3	HAMILTONIANO DE DIRAC EM UM ESPAÇO-TEMPO DE (2+1) DIMENSÕES EM UMA SUPERFÍCIE CURVA COM SIMETRIA AXIAL. .	24
3.1	Definição da métrica η_{ab} e $g_{\mu\nu}$	24
3.2	Métrica para uma superfície com simetria axial.	25
3.3	Equação de Dirac sem massa em espaços curvos	26
3.4	Hamiltoniano de Dirac para o espaço plano	27
3.5	Hamiltoniano de Dirac para o espaço curvo	30
4	DESCRIÇÃO GEOMÉTRICA DAS SUPERFÍCIES CURVAS.	34
4.1	Superfície Gaussiana	34
4.2	Escalar de Ricci	35
4.3	Pseudopotencial de Gauge para a deformação gaussiana	37
4.4	Superfície Tipo Vulcão	38
4.5	Escalar de Ricci para o vulcão	39
4.6	Pseudopotencial de Gauge para a superfície tipo vulcão	41
5	DINÂMICA DE FÉRMIONS EM SUPERFÍCIES CURVAS: ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE GEOMETRIAS GAUSSIANA E VULCÂNICA	43
5.1	Soluções Estacionárias e Redução Radial da Equação de Dirac	43
5.2	Densidade de probabilidade para um espinor	44
5.3	Desacoplamento do Espinor: Equações diferenciais para ψ_A e ψ_B	46
5.4	Soluções via métodos aproximativos	49
5.5	Primeira aproximação: Velocidade de Fermi	49
5.6	Fase geométrica induzida pela curvatura: redefinindo ψ_A e ψ_B	52
5.7	Dinâmica do elétron na superfície gaussiana	53
5.8	Potencial Efetivo	54
5.9	Amplitudes de Probabilidade	57
5.10	Dinâmica do Elétron na Superfície Tipo Vulcão	61
6	CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO	65
6.1	Hamiltoniano efetivo para um sistema com um campo B externo	65
6.2	Equações diferenciais para ψ_A e ψ_B na presença de campo magnético . . .	67
6.3	Soluções e os potenciais de confinamento	69
6.4	Superfície Gaussiana e Superfície do Tipo Vulcão sob um Campo Magnético Externo	73
6.5	Densidades de probabilidades	74
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	78
	REFERÊNCIAS	80

APÊNDICE A -- SÍMBOLOS DE CHRISTOFFEL	86
APÊNDICE B -- CONEXÃO DE SPIN	90
APÊNDICE C -- ÁLGEBRA DE CLIFFORD	97

1 INTRODUÇÃO

No ano de 1947, o físico canadense Philip R. Wallace fez a primeira descrição teórica do grafeno enquanto estudava a estrutura eletrônica do grafite[1]. Ele utilizou a chamada aproximação de "tight binding" para desenvolver a estrutura das bandas de energia eletrônica e as zonas de Brillouin para o grafite. Durante muito tempo, filmes finos de grafite foram estudados; no entanto, o isolamento de uma camada atômica ainda não havia sido alcançado. Em 1962, Boehm *et al.*[2] introduziram o termo "graphene" ao descreverem as camadas individuais de carbono derivadas do grafite. Foi então que, no ano de 2004, os físicos Andre Geim e Konstantin Novoselov, usando um método conhecido como "método da fita adesiva (Scotch Tape Method)", isolaram com sucesso o grafeno[3], rendendo a eles, no ano de 2010, o Prêmio Nobel de Física por suas contribuições.

Nos últimos anos, sistemas bidimensionais como o grafeno têm atraído grande interesse devido às suas propriedades eletrônicas, mecânicas e térmicas excepcionais [4,5]. Um dos aspectos mais notáveis do grafeno é que, para baixos valores de momento, os elétrons se comportam efetivamente como partículas relativísticas sem massa, o que resulta em uma elevada mobilidade eletrônica [6]. Esse comportamento decorre da estrutura de bandas do grafeno, que apresenta uma dispersão energética aproximadamente linear nas proximidades dos chamados pontos de Dirac, onde a energia varia com o momento. Além da alta condutividade elétrica, o grafeno possui uma alta resistência a trações, uma alta condutividade térmica, uma grande flexibilidade além de ser um material transparente [7–9]. Portanto, essas propriedades fazem do grafeno um material de interesse significativo para aplicações em diversas áreas tecnológicas motivando uma ampla pesquisa em torno dele[10].

Experimentos utilizando Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM) revelaram que as amostras de grafeno suspensas apresentam uma curvatura espontânea, aparentemente aleatória [11, 12]. Essa curvatura se manifesta como ondulações de diversos tamanhos, que podem atingir alturas de alguns angstroms e comprimentos de diversos nanômetros. Observações dessas ondulações também foram realizadas posteriormente utilizando Microscopia de Varredura por Tunelamento (STM) [13–15]. David Nelson, em seus estudos sobre membranas flexíveis, analisou como as flutuações térmicas e mecânicas em sistemas bidimensionais levam a um acoplamento intrínseco entre os deslocamentos no plano (in-plane) e fora do plano (out-of-plane), resultando em ondulações espontâneas. No caso do grafeno, esses princípios teóricos ajudam a explicar a origem das ondulações, que emergem devido à interação entre tensões internas e flutuações estruturais[16].

Essas deformações geométricas influenciam diretamente a dinâmica dos férmions; modificando o hamiltoniano efetivo, levando a velocidades de Fermi dependentes da posição e à geração de campos de gauge efetivos, ou pseudocampos [17–19]. Anisotropias locais, inhomogeneidades de carga, a formação de poços ou barreiras efetivos que favorecem o surgimento de possíveis estados ligados e modificações do potencial efetivo são exemplos de efeitos induzidos pela curvatura sobre a dinâmica dos férmions [20–24]. Essas e outras propriedades também têm sido exploradas em geometrias como o cone [25], a fita de Möbius [17], a superfície helicoidal [14, 26], a ponte catenoide [27, 28] e a superfície gaussiana [13].

Inspirados por estes trabalhos e principalmente pelo trabalho de Vozmediano et al. [13], no qual os autores analisaram as propriedades eletrônicas de folhas de grafeno com rugosidades suaves utilizando funções de Green, investigamos como uma curvatura localizada modifica a dinâmica de elétrons definidos intrinsecamente sobre superfícies curvas. Mais especificamente, exploramos como essas saliências afetam os estados eletrônicos observáveis, tanto em termos do espectro de energia quanto da densidade de probabilidade local. Inicialmente, acoplamos a equação de Dirac à geometria curva por meio de um acoplamento mínimo com as vielbeins e as conexões de spin da superfície, de modo a incorporar consistentemente os efeitos da curvatura. Empregamos duas superfícies com simetria axial: uma saliência do tipo gaussiana e outra do tipo vulcão, cujos perfis radiais se diferenciam pela presença de um vale central ou de um ápice máximo em $r = 0$. A simetria axial implica a conservação do momento angular total na direção z , permitindo reduzir a equação de Dirac a um problema unidimensional ao longo da coordenada radial, o que simplifica tanto o tratamento analítico quanto os cálculos numéricos. Verificamos que ambas as geometrias produzem estados não localizados, isto é, espalhados no espaço, cujas densidades de probabilidade apresentam acúmulo significativo nas regiões das saliências, sugerindo que a curvatura atua como um potencial efetivo capaz de atrair ou repelir férmions, dependendo do perfil topográfico.

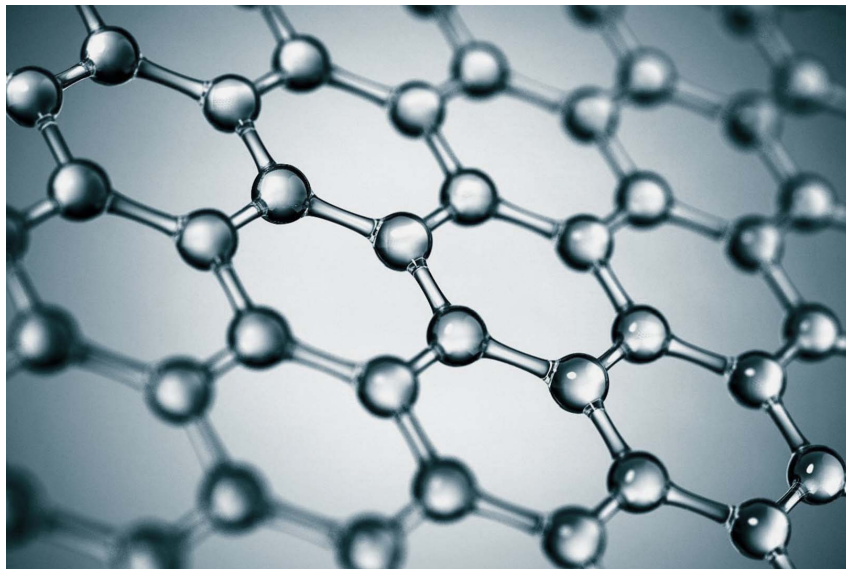
Além disso, introduzimos um campo magnético externo para analisar os efeitos combinados do pseudocampo de gauge gerado pela curvatura com os de um campo magnético real. Observamos que, na ausência de campo externo, não há formação de estados ligados, enquanto a introdução do campo magnético leva ao surgimento de níveis de Landau ligados [29]. Isso ocorre porque o campo magnético altera o potencial efetivo de forma assintótica, conduzindo à quantização da energia [30]. Assim, este trabalho também se propõe a investigar como esse campo externo modifica as densidades de probabilidade sobre as superfícies.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no Capítulo 2, apresentamos os conceitos básicos sobre o grafeno, com ênfase em sua estrutura eletrônica e propriedades relativísticas emergentes. O Capítulo 3 é dedicado ao formalismo da equação de Dirac em $(2 + 1)$ dimensões sobre superfícies curvas com simetria axial, onde construímos o Hamiltoniano efetivo a partir da métrica, dos símbolos de Christoffel e do campo das tetrádas. No Capítulo 4, analisamos as propriedades geométricas das superfícies consideradas, uma com perfil Gaussiano e outra com perfil do tipo vulcão, discutindo seus efeitos sobre os potenciais de gauge induzidos pela curvatura. No Capítulo 5, estudamos a dinâmica dos férmions nessas geometrias curvas, com ênfase na formação ou ausência de estados ligados. O Capítulo 6 incorpora a presença de um campo magnético externo, abordando sua influência sobre os potenciais efetivos, os espectros de energia e as distribuições de probabilidade. Por fim, apresentamos as considerações finais e as perspectivas para trabalhos futuros. Apêndices com cálculos auxiliares e definições geométricas complementam o desenvolvimento teórico.

2 INTRODUÇÃO AO GRAFENO

O grafeno é um material bidimensional formado por uma única camada de átomos de carbono dispostos em um padrão hexagonal, como mostra na Figura 1, no qual possui uma rede cristalina em forma de colmeia[6, 31]. A rede Favos de Mel (ou honeycomb) do grafeno possui uma estrutura do tipo hexagonal e periódica, no entanto, não forma uma rede de Bravais¹ com um átomo na base[31,35]. No entanto, este arranjo pode ser decomposto em duas sub-redes (sublattices) triangulares, representadas pelos pontos A e B, como mostra na Figura 2, de modo que a sub-rede B pode ser gerada a menos de uma rotação de 180° da sub-rede A. Assim, o grafeno em sua estrutura completa incorpora características de uma rede de Bravais bipartida devido às suas duas sub-redes A e B, que juntas criam uma estrutura repetida e simétrica.

Figura 1 – Estrutura Hexagonal do Grafeno.



Fonte: Elaborada pelo Autor.

2.1 Vetores de rede

A sub-rede A possui dois vetores de rede primitivos da rede real \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , conhecidos como vetores de Bravais que são dados por

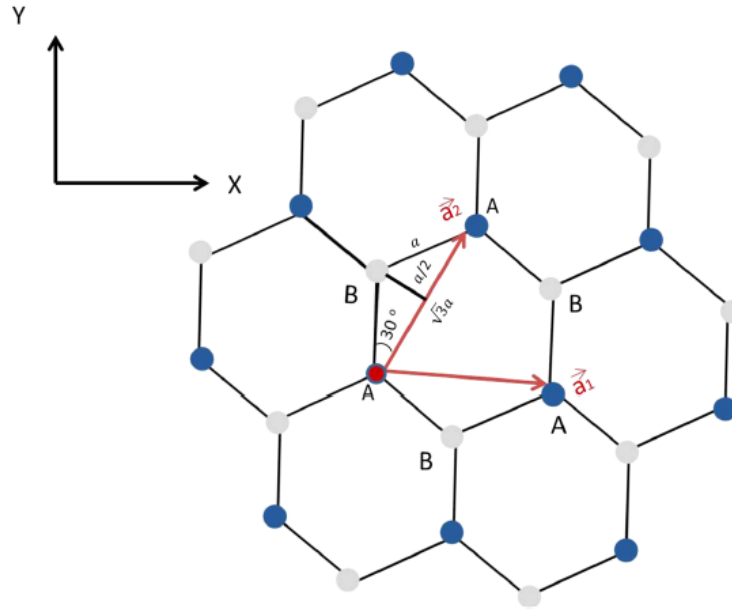
$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}a\hat{x}, \quad (2.1)$$

$$\vec{a}_2 = \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad (2.2)$$

onde a constante $a = 1,42\text{\AA}$ é conhecida como o parâmetro de rede e representa a distância entre os átomos vizinhos mais próximos.

¹Uma rede de Bravais é um conjunto infinito de pontos dispostos e orientados de tal maneira que parece exatamente o mesmo, independente do ponto do qual a estrutura é observada[32–34].

Figura 2: A estrutura hexagonal com os vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e as duas sub-redes A e B.



Fonte: [36].

Dado que conhecemos a rede cristalina do espaço real, podemos determinar também vetores relativos entre primeiros vizinhos, ou seja, vetores que conectam um átomo da sub-rede A, com átomos da sub-rede B. Os vetores $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ representados na Fig. 3 abaixo são dados por

$$\vec{\delta}_1 = a\hat{y}, \quad (2.3)$$

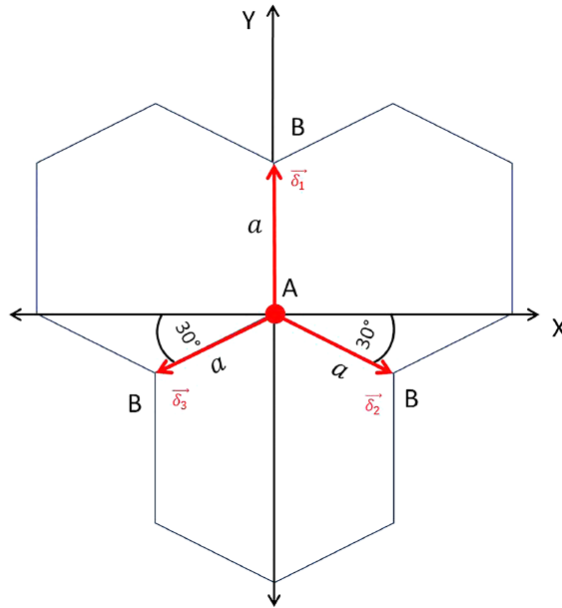
$$\vec{\delta}_2 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}), \quad (2.4)$$

$$\vec{\delta}_3 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}). \quad (2.5)$$

Note que para um átomo da sub-rede B, os vetores relativos ligando-o aos três primeiros vizinhos da sub-rede A são dados por $-\vec{\delta}_1, -\vec{\delta}_2$ e $-\vec{\delta}_3$. Além disso, a rede recíproca² é determinada obtendo os vetores primitivos da rede recíproca[38, 39]. Esses vetores nos permite construir toda a rede recíproca considerando um ponto como origem e realizando translações desse ponto. Na figura 4, notamos que a rede recíproca também consiste numa rede hexagonal.

²A rede recíproca é definida no espaço de momentos (ou espaço κ). Nela, cada ponto corresponde a um vetor de onda que descreve as periodicidades do cristal. Enquanto isso, a rede real representa a disposição espacial dos átomos em um cristal, com pontos que correspondem diretamente às posições dos átomos no espaço físico[6, 37].

Figura 3 – Conexão dada pelos vetores $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$, entre um átomo da sub-rede A e seus primeiros vizinhos.



Fonte: [36].

Os vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 então são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right), \quad (2.6)$$

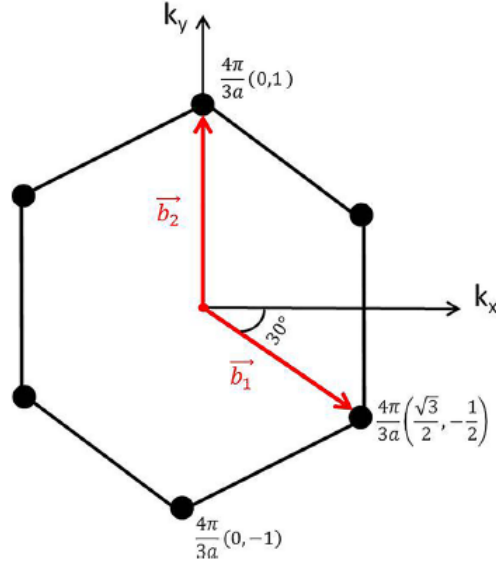
$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3a} \hat{y}. \quad (2.7)$$

A zona de Brillouin (ZB) é definida como a região no espaço recíproco que contém todos os vetores de onda inequivalentes de um cristal. A primeira ZB é a mais importante, pois contém todas as informações necessárias para descrever as propriedades eletrônicas fundamentais de um material periódico[40]. No grafeno, a primeira ZB também possui o formato de um hexágono regular, refletindo a simetria da rede real. Dentro dessa zona, há pontos de interesse especial, como os pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' , que estão localizados nos vértices do hexágono como ilustra a Fig. 5[41]. Nesses pontos, a banda de condução e a banda de valência se tocam, formando os chamados cones de Dirac.

2.2 Energias de banda no grafeno

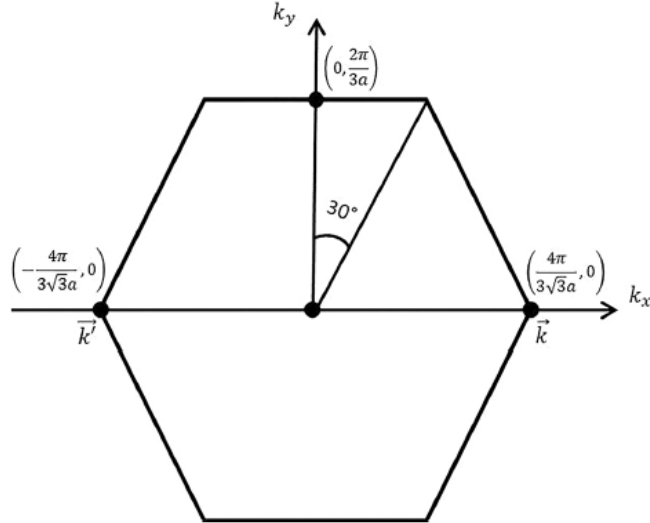
Desconsiderando a interação entre segundos vizinhos e a repulsão coulombiana, o hamiltoniano que descreve a energia total do sistema, incluindo as interações entre vizinhos, é dado por:

Figura 4 – Estrutura hexagonal da rede recíproca do favo de mel gerada pelos vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 .



Fonte: [36].

Figura 5 – Primeira zona de Brillouin na rede recíproca do grafeno.



Fonte: [36].

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma} + \hat{b}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}), \quad (2.8)$$

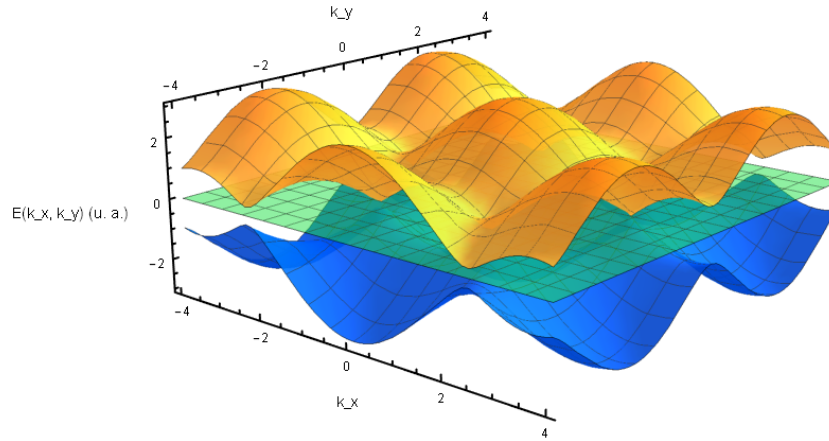
onde t é o parâmetro de hopping (energia de tunelamento), que representa a energia necessária para um elétron saltar entre átomos vizinhos ($t \approx 2,7 \text{ eV}$ no grafeno). Enquanto isso, $\hat{a}_{i\sigma}$ ($\hat{a}_{i\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila (cria) um elétron de spin verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no i -ésimo átomo da sub-rede A, $\hat{b}_{j\sigma}$ ($\hat{b}_{j\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila (cria) elétrons na sub-rede B, $\langle ij \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ a soma sobre os segundos vizinhos. mesma sub-rede.

Aplicando o modelo de tight-binding³ ao grafeno, encontramos duas soluções para a energia do sistema, de igual módulo e sinais contrários, para cada valor do vetor de onda $\vec{\kappa}$. A energia dos elétrons como função do vetor de onda $\vec{\kappa}$ (no espaço recíproco) é dada por:

$$E_{\pm}(\kappa) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{3\kappa_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}\kappa_x a}{2}\right)}. \quad (2.9)$$

As soluções positivas ($E > 0$) correspondem à banda de condução, associada a estados de maior energia onde os elétrons podem ser excitados, enquanto as soluções negativas ($E < 0$) correspondem à banda de valência, preenchida por elétrons no estado fundamental. Essas bandas são mostradas na Fig. 6 dentro da primeira ZB.

Figura 6 – Bandas de energia do grafeno mostradas na primeira zona de Brillouin.



Elaborado pelo autor.

Outro aspecto importante que devemos considerar é que a energia $E = 0$ (interseção dos cones) define o nível de Fermi do sistema, que corresponde à energia máxima ocupada por elétrons no estado fundamental em temperatura zero. No grafeno, esse nível coincide com os pontos de Dirac, caracterizando-o como um semicondutor de gap zero[6]. Desse modo, podemos de imediato perceber que a superposição das bandas nos pontos Dirac resulta em um gap de energia nulo, o que significa que o grafeno não possui uma faixa proibida de energias entre as bandas. Isso implica que, mesmo em condições ambientes, elétrons próximos a região onde temos $E = 0$ podem transitar livremente entre as bandas de valência e condução com mínima energia, resultando em condutividade excepcionalmente alta e comportamento eletrônico análogo ao de férmions relativísticos sem massa[36].

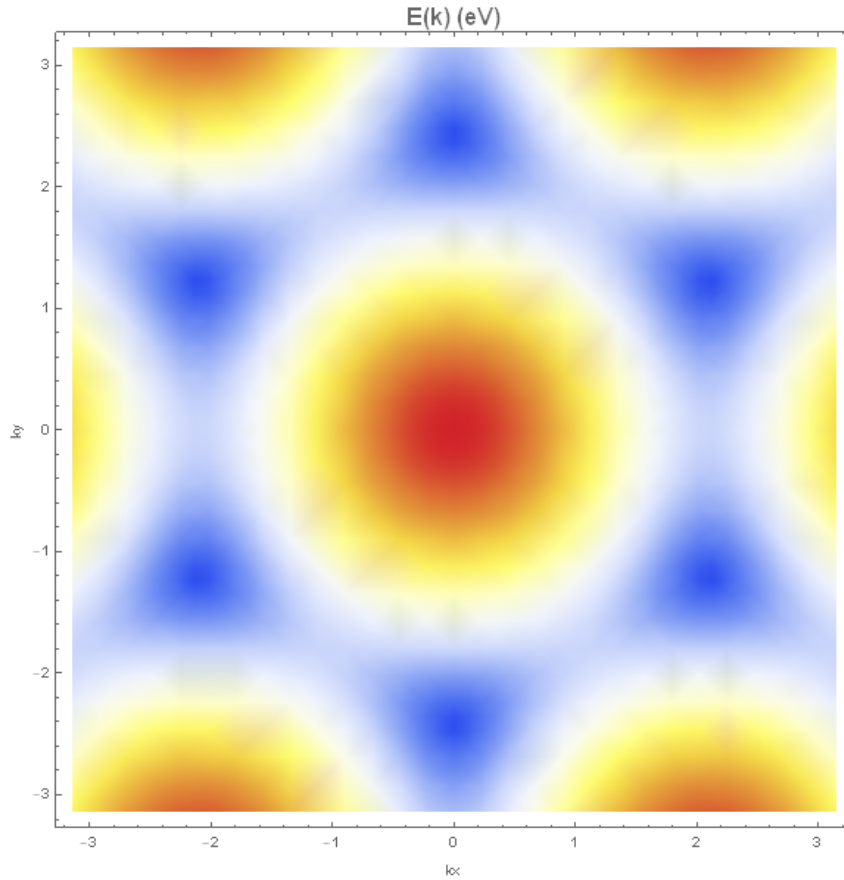
A energia dos elétrons próximos aos pontos de Dirac (K e K') no grafeno é descrita pela equação:

$$E(\vec{\kappa}) = \pm \hbar v_F |\vec{\kappa}|, \quad (2.10)$$

onde $E(\vec{\kappa})$ é a energia do elétron, v_F é a velocidade de Fermi, que é aproximadamente 10^6 m/s e $|\vec{\kappa}|$ é o módulo do vetor de onda no espaço recíproco.

³Descreve elétrons em cristais considerando interações localizadas entre átomos vizinhos, onde elétrons "sal-

Figura 7 – Representação dos cones de Dirac mostradas na primeira zona de Brillouin.



Elaborado pelo Autor.

Nota-se que justamente nos pontos de Dirac, existe uma relação de dispersão linear entre vetor de onda e a energia que é análoga à relação energia-momento para partículas relativísticas sem massa na teoria de Dirac, $E = c|\vec{p}|$, onde c é a velocidade da luz e \vec{p} é o momento. Na Fig. 7, podemos ver regiões azul-escuras. Essas regiões representam os mínimos de energia, ou seja, os pontos de Dirac. Portanto, podemos afirmar categoricamente que no grafeno os elétrons próximos dos pontos de Dirac, comportam-se efetivamente como férmions de Dirac sem massa, mas o papel da velocidade da luz aqui é assumido pela velocidade de Fermi v_F [42,43].

3 HAMILTONIANO DE DIRAC EM UM ESPAÇO-TEMPO DE (2+1) DIMENSÕES EM UMA SUPERFÍCIE CURVA COM SIMETRIA AXIAL.

Os elétrons em grafeno apresentam uma dinâmica peculiar: suas bandas de valência e condução se tocam nos chamados pontos de Dirac, e, nas proximidades desses pontos, a relação de dispersão $E(\kappa)$ é aproximadamente linear em relação ao momento cristalino κ . Essa linearidade torna a dinâmica eletrônica formalmente análoga à de férmions de Dirac sem massa na teoria quântica relativística [44, 45]. Como consequência, o Hamiltoniano efetivo que descreve os elétrons em grafeno assume uma forma linear no momento, similar ao Hamiltoniano de Dirac em (2+1) dimensões [13, 46].

Neste capítulo, nosso objetivo é deduzir a forma do Hamiltoniano de Dirac sem massa para duas situações distintas: primeiro, no espaço plano, que representa uma folha de grafeno idealmente sem deformações; depois, em uma região com curvatura, associada a deformações geométricas específicas da rede. A formulação adotada baseia-se no trabalho de Vozmediano et al. [13], onde os autores apresentam a estrutura do Hamiltoniano de Dirac para elétrons em grafeno sobre superfícies curvas com simetria axial. As deformações consideradas neste trabalho obedecem a uma simetria axial, isto é, o sistema permanece invariante sob rotações em torno do eixo z . Essa simetria reduz a complexidade do problema e permite uma análise mais detalhada dos efeitos da curvatura. Como exemplos concretos de geometrias curvas, estudaremos superfícies do tipo gaussiana e do tipo vulcão, ambas com curvatura concentrada em uma região central. A comparação entre o caso plano e os casos curvos nos permitirá compreender como a geometria da superfície influencia a dinâmica dos férmions, revelando como a curvatura age como um campo efetivo que modifica o comportamento quântico dos elétrons.

Um dos conceitos fundamentais a se entender inicialmente é o de métrica, que descreve como as distâncias e ângulos são definidos sobre a superfície [47]. Assim, a seguir, introduziremos formalmente esse conceito, essencial para construirmos a equação de Dirac em um espaço curvo.

3.1 Definição da métrica η_{ab} e $g_{\mu\nu}$.

A métrica de Minkowski η_{ab} , em um espaço-tempo plano $(n+1)$ -dimensional, é um tensor constante e simétrico de rank 2 ($\eta_{ab} = \eta_{ba}$) que descreve a geometria do espaço-tempo na ausência de curvatura [48, 49]. Sua função é definir a estrutura causal e métrica inerente à Relatividade Especial [50]. Matematicamente, ela estabelece um produto interno invariante no espaço-tempo de Minkowski [51, 52].

Em coordenadas cartesianas (x^0, x^1, \dots, x^n) , onde $x^0 = ct$ (com c sendo a velocidade da luz e t o tempo), a métrica é expressa pelo elemento de linha:

$$ds^2 = \eta_{ab} dx^a \otimes dx^b, \quad (3.1)$$

cujas componentes formam uma matriz diagonal constante:

$$\eta_{ab} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

onde dx^a e dx^b são diferenciais das coordenadas espaço-temporais. A métrica de Minkowski define a separação espaço-temporal entre eventos, preservando a invariância do intervalo ds^2 sob transformações de Lorentz[53–55].

A métrica $g_{\mu\nu}$ em um espaço curvo n -dimensional é um tensor simétrico de rank 2 ($g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$) definido sobre uma variedade diferenciável[56–58]. Sua função primordial é quantificar a geometria intrínseca do espaço, determinando distâncias, ângulos e volumes locais. Matematicamente, é um objeto que associa a cada ponto do espaço um produto interno no espaço tangente à variedade nesse ponto[59–61].

Em coordenadas locais x^μ , a métrica é expressa pelo elemento de linha

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x) dx^\mu \otimes dx^\nu, \quad (3.3)$$

onde dx^μ e dx^ν são diferenciais das coordenadas, $g_{\mu\nu}(x)$ são as componentes locais do tensor métrico, formando uma matriz simétrica $n \times n$ [62–64].

3.2 Métrica para uma superfície com simetria axial.

Para compreender a influência da geometria na dinâmica dos elétrons, é essencial construir o Hamiltoniano utilizando o formalismo covariante, que incorpora a métrica induzida pela superfície tridimensional sobre a qual os elétrons se movimentam. Inicialmente, desenvolveremos o Hamiltoniano de Dirac para o espaço plano, estabelecendo assim a base teórica do problema. Em seguida, analisaremos como esse Hamiltoniano é modificado pela presença de curvatura na folha de grafeno.

Para isso, torna-se necessário determinar uma métrica geral que descreva uma deformação suave e bem comportada da superfície, ou seja, uma curvatura axialmente simétrica, livre de singularidades, acoplada de forma contínua à região plana do grafeno.

Consideramos uma superfície descrita pela função $z = z(r)$, onde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a coordenada radial no plano (x, y) . Essa função determina a altura da deformação em relação ao plano base $z = 0$, e assume-se que a superfície seja assintoticamente plana quando $r \rightarrow \infty$. Essa escolha é apropriada para modelar deformações localizadas, como cúpulas ou depressões centradas na origem [13].

O espaço-tempo associado à superfície pode ser inicialmente descrito por uma métrica no sistema de coordenadas (t, r, θ) , da forma:

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - r^2 d\theta^2 - dz^2. \quad (3.4)$$

No entanto, como a coordenada z é uma função de r , podemos reescrever o termo

diferencial dz^2 como:

$$dz^2 = \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 dr^2, \quad (3.5)$$

Desse modo, definimos então uma função de curvatura radial tal que

$$\left(\frac{dz}{dr} \right)^2 = \alpha f(r), \quad (3.6)$$

onde $f(r)$ caracteriza o perfil radial da curvatura, e α é um parâmetro de perturbação que controla a intensidade da deformação. Substituindo na métrica, temos:

$$ds^2 = dt^2 - (1 + \alpha f(r)) dr^2 - r^2 d\theta^2, \quad (3.7)$$

onde α é um parâmetro de perturbação e é dado por

$$\alpha = \frac{A^2}{b^2}. \quad (3.8)$$

A métrica do espaço-tempo assume a forma matricial:

$$g_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -(1 + \alpha f(r)) & 0 \\ 0 & 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

com $\mu, \nu = 0, 1, 2$, correspondendo respectivamente às coordenadas t, r, θ . A parte espacial da métrica, ou seja, o subconjunto g_{ij} com $i, j = 1, 2$, é dada por:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} -(1 + \alpha f(r)) & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Na ausência de curvatura ($\alpha = 0$), ou seja, para uma superfície plana com $z(r) = 0$, a métrica se reduz à métrica padrão de coordenadas polares no plano:

$$g_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

e, portanto, a parte espacial torna-se:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

3.3 Equação de Dirac sem massa em espaços curvos

Para descrever os estados quânticos dos elétrons (férmions) em uma superfície curva de grafeno, utiliza-se a equação de Dirac sem massa adaptada para espaços curvos. Essa abordagem é necessária porque a curvatura da superfície modifica a estrutura do espaço onde os férmions se propagam, exigindo o uso de derivadas covariantes para preservar a invariância

local.

A equação de Dirac se massa para um espaço curvo é dada por:

$$i\hbar v_F \gamma^\mu (\partial_\mu + \Omega_\mu) \psi = 0, \quad (3.13)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi do grafeno e Ω_μ representa a conexão de spin, a qual garante a definição correta das derivadas covariantes no espaço curvo [65,66]. As matrizes γ^μ incorporam a estrutura relativística dos férmions e devem satisfazer a relação de anticomutação (álgebra de Clifford):

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}. \quad (3.14)$$

A conexão de spin Ω_μ é um operador (matriz) que atua sobre o campo espinorial para garantir que a derivada covariante de um espinor seja bem definida em espaços curvos[67, 68]. Ela assume a forma:

$$\Omega_\mu = \frac{1}{8} \omega_\mu^{ab} [\gamma_a, \gamma_b], \quad (3.15)$$

ou também pela expressão

$$\Omega_\mu(x) = \frac{1}{4} \gamma_a \gamma_b e_\lambda^a(x) g^{\lambda\sigma}(x) \nabla_\mu e_\sigma^b(x), \quad (3.16)$$

com

$$\nabla_\mu e_\sigma^a = \partial_\mu e_\sigma^a - \Gamma_{\mu\sigma}^\lambda e_\lambda^a, \quad (3.17)$$

em que os índices a e b referem-se ao referencial local (plano de Minkowski) e os colchetes denotam o comutador entre as matrizes de Dirac[69, 70]. O termo ω_μ^{ab} é a conexão de spin de Cartan, construída a partir das vierbeins e_μ^a que ligam o espaço curvo ao espaço tangente plano (de Minkowski):

$$\omega_\mu^{ab} = e_\nu^a \left(\partial_\mu e^{\nu b} + \Gamma_{\mu\lambda}^\nu e^{\lambda b} \right). \quad (3.18)$$

Os coeficientes de conexão afim $\Gamma_{\mu\nu}^\rho$, por sua vez, são definidos a partir da variação da métrica do espaço-tempo e têm a forma:

$$\Gamma_{\mu\nu}^\rho = \frac{1}{2} g^{\rho\lambda} (\partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\mu\lambda} - \partial_\lambda g_{\mu\nu}). \quad (3.19)$$

A introdução dos vierbeins e da conexão de spin é necessária porque, embora os férmions sejam definidos localmente em referenciais planos, a geometria do espaço-tempo sobre o qual se propagam é curva. Portanto, o formalismo covariante permite adaptar a equação de Dirac para superfícies curvas mantendo a consistência com a geometria diferencial envolvida. Esse será o ponto de partida para a construção do Hamiltoniano efetivo para férmions em folhas de grafeno com curvatura axial.

3.4 Hamiltoniano de Dirac para o espaço plano

Antes de tratarmos o caso curvo, é fundamental estabelecer a forma do Hamiltoniano de Dirac no espaço plano utilizando coordenadas polares. Este será o ponto de partida para compreendermos como a curvatura modifica a dinâmica dos férmions em superfícies deforma-

das.

No caso plano (isto é, na ausência de curvatura), a métrica espacial em coordenadas polares é dada por:

$$g_{ij}^{(\text{plano})} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

A partir dessa métrica, obtemos os símbolos de Christoffel não nulos:

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = -r, \quad (3.21)$$

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}. \quad (3.22)$$

O cálculo completo desses símbolos encontra-se detalhado no **Apêndice A**. Desse modo, a equação de Dirac sem massa no espaço plano, em coordenadas polares, pode ser escrita como:

$$i\hbar v_F \gamma^\mu \nabla_\mu \psi = 0, \quad (3.23)$$

ou, de forma equivalente, utilizando a conexão de spin:

$$i\hbar v_F \gamma^\mu \left(\partial_\mu + \frac{1}{4} \omega_\mu^{ab} \gamma_a \gamma_b \right) \psi = 0, \quad (3.24)$$

onde ∇_μ é a derivada covariante agindo sobre espinores, γ^μ são as matrizes de Dirac generalizadas para o novo sistema de coordenadas, e ω_μ^{ab} é a conexão de spin de Cartan.

Para implementar esse formalismo, é necessário introduzir as *vierbeins* (ou *tetrádas*) e_μ^a . As vierbeins são conjuntos de quatro vetores linearmente independentes definidos em cada ponto do espaço-tempo que estabelecem a relação entre a métrica curva $g_{\mu\nu}$ e a métrica de Minkowski η_{ab} por meio da seguinte identidade [67]:

$$g_{\mu\nu} = e_\mu^a e_\nu^b \eta_{ab}, \quad (3.25)$$

sendo que os índices latinos a,b referem-se ao referencial local de Minkowski, enquanto os índices gregos μ, ν pertencem ao sistema de coordenadas geral [71, 72]. A ortonormalidade entre as vierbeins e suas inversas é expressa por:

$$e_\mu^a e_b^\mu = \delta_b^a, \quad (3.26)$$

e, no caso puramente espacial com coordenadas polares, adotamos para a métrica de Minkowski a forma:

$$\eta_{ab} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

Essa relação não determina de forma única os vierbeins, permitindo diferentes escolhas associadas a diferentes referenciais locais. Duas escolhas naturais se destacam:

Primeira escolha:

$$e_\mu^a = (e_a^\mu)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}, \quad (3.28)$$

essa escolha mantém a forma cartesiana das matrizes γ^a , o que resulta em uma conexão de gauge constante [13].

Segunda escolha:

$$e_\mu^a = \begin{bmatrix} \cos \theta & -r \sin \theta \\ \sin \theta & r \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

essa configuração corresponde a um referencial que gira com o ângulo polar θ , alterando a estrutura das matrizes γ^a de forma que não gera uma conexão de gauge efetiva [46].

Essas diferentes escolhas de vierbeins impactam diretamente a forma final do Hamiltoniano efetivo que será obtido. Ao longo deste trabalho, adotaremos a primeira escolha por sua simplicidade e porque ela preserva a forma padrão das matrizes de Dirac, facilitando a análise da transição do caso plano para o caso com curvatura.

O inverso da vierbein da primeira escolha é dado por:

$$e_a^\mu = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

A conexão de spin definida pela Eq. 3.15 fica:

$$\Omega_r = 0, \quad \Omega_\theta = \frac{i}{2} \sigma_3, \quad (3.31)$$

onde $\omega_\theta^{12} = -\omega_\theta^{21} = 1$. Os cálculos completos da conexão de spin para essa configuração encontram-se no Apêndice B.

Com essas conexões, a equação de Dirac sem massa no espaço plano, em coordenadas polares, assume a forma:

$$i\hbar v_F \gamma^0 \partial_0 \psi = -i\hbar v_F \left[\gamma^r \partial_r + \gamma^\theta (\partial_\theta + \Omega_\theta) \right] \psi. \quad (3.32)$$

Observando que:

$$\partial_0 = \frac{1}{v_F} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.33)$$

podemos reescrevê-la na forma de equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (3.34)$$

em que o Hamiltoniano de Dirac é dado por:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \left[\gamma^0 \gamma^r \partial_r + \gamma^0 \gamma^\theta \left(\partial_\theta + \frac{i}{2} \sigma_3 \right) \right]. \quad (3.35)$$

As matrizes γ^μ relacionam-se às γ^a d por meio das vierbeins:

$$\gamma^r = e_a^r \gamma^a, \quad \gamma^\theta = e_a^\theta \gamma^a, \quad (3.36)$$

o que nos dá explicitamente:

$$\gamma^r = \gamma^1, \quad \gamma^\theta = \frac{1}{r}\gamma^2. \quad (3.37)$$

Substituindo essas expressões no Hamiltoniano, obtemos:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \left[\gamma^0 \gamma^1 \partial_r + \frac{\gamma^0 \gamma^2}{r} \left(\partial_\theta + \frac{i}{2} \sigma_3 \right) \right]. \quad (3.38)$$

Para dar continuidade à construção do Hamiltoniano de Dirac, é necessário especificar uma representação explícita para as matrizes γ^μ . Essas matrizes devem satisfazer a álgebra de Clifford, isto é, a relação de anticomutação $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$, a qual garante a consistência da equação de Dirac com a estrutura geométrica do espaço-tempo[73, 74]. Neste trabalho, adotamos a seguinte representação para as matrizes de Dirac no espaço bidimensional:

$$\gamma_0 = \sigma_3, \quad \gamma_1 = i\sigma_2, \quad \gamma_2 = -i\sigma_1, \quad (3.39)$$

onde σ_i são as matrizes de Pauli usuais. Essa escolha é conveniente por ser uma representação mínima (2×2), apropriada para descrever férmions sem massa no grafeno, e por preservar a estrutura hermitica do Hamiltoniano. A verificação explícita de que essa representação satisfaz corretamente a álgebra de Clifford com a métrica adotada pode ser consultada no **Apêndice C**.

Com a representação escolhida para as matrizes de Dirac e a adoção da primeira escolha de vierbeins, podemos agora substituir essas expressões na equação do Hamiltoniano previamente obtida. Essa substituição resulta em uma forma explícita e operacional do Hamiltoniano de Dirac em coordenadas polares, adequada para o estudo de férmions sem massa no plano. Dessa maneira, obtemos o Hamiltoniano final para o caso plano:

$$\hat{H}_{\text{flat}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & \partial_r + \frac{i}{r}\partial_\theta + \frac{1}{2r} \\ \partial_r - \frac{i}{r}\partial_\theta + \frac{1}{2r} & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.40)$$

Esta forma evidencia o acoplamento entre as componentes do espinor e a estrutura do sistema de coordenadas, onde o termo adicional $\frac{1}{2r}$ provém da conexão de spin associada à curvatura do sistema de coordenadas polares. Esse Hamiltoniano servirá como base para analisar como a presença de curvatura na superfície modifica a dinâmica dos férmions, o que será explorado nas seções seguintes.

3.5 Hamiltoniano de Dirac para o espaço curvo

Ao introduzirmos a curvatura na superfície onde os férmions se propagam, a métrica espacial deixa de ser a métrica plana usual e passa a depender do perfil geométrico da deformação. Para uma superfície com simetria axial descrita por uma função $z = z(r)$, a métrica espacial em coordenadas polares assume a forma:

$$g_{ij}^{(\text{curvo})} = \begin{bmatrix} -(1 + \alpha f(r)) & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (3.41)$$

onde $\alpha f(r)$ codifica a contribuição da curvatura, conforme discutido anteriormente.

A partir dessa métrica, podemos calcular os coeficientes de conexão afim (símbolos de Christoffel), que são necessários para a construção da derivada covariante e, consequentemente, da conexão de spin. Os coeficientes não nulos para essa geometria são:

$$\Gamma_{rr}^r = \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))}, \quad (3.42)$$

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = -\frac{r}{(1 + \alpha f(r))}, \quad (3.43)$$

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}. \quad (3.44)$$

Esses coeficientes de conexão afim refletem as modificações na geometria local induzidas pela curvatura da superfície, afetando diretamente a forma da derivada covariante e, portanto, a equação de Dirac em espaços curvos. A presença da função $f(r)$ e de sua derivada $f'(r)$ introduz correções específicas que não estavam presentes no caso plano. O cálculo detalhado desses símbolos de Christoffel encontra-se no **Apêndice A**, onde derivamos explicitamente os termos resultantes da deformação da métrica.

A presença de curvatura modifica a métrica da superfície dada pela Eq.3.41. O inverso dessa métrica é então dado por:

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} -(1 + \alpha f(r))^{-1} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{r^2} \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

Escolhemos a seguinte matriz vierbein e_μ^a , que relaciona o referencial curvo ao referencial localmente plano:

$$e_\mu^a = \begin{bmatrix} (1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta & -r \sin \theta \\ (1 + \alpha f(r))^{1/2} \sin \theta & r \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (3.46)$$

cujas inversas são:

$$e_a^\mu = \begin{bmatrix} (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \cos \theta & (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta \\ -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\cos \theta}{r} \end{bmatrix}. \quad (3.47)$$

A partir dessas vierbeins, podemos calcular a conexão de spin. Para o componente radial, encontramos:

$$\omega_r^{11} = \omega_r^{22} = \omega_r^{12} = \omega_r^{21} = 0, \quad (3.48)$$

o que implica que a conexão de spin radial é nula:

$$\Omega_r = 0. \quad (3.49)$$

Os detalhes do cálculo da conexão de spin estão apresentados no Apêndice B.

Embora os componentes das vierbeins e_μ^a dependam explicitamente da coordenada angular θ , como evidenciado por termos envolvendo $\cos \theta$ e $\sin \theta$ na Eq. 3.46, o cálculo direto da conexão de spin ω_θ^{12} (ver Apêndice B) mostra que todas essas dependências se cancelam rigorosamente na expressão final. O resultado depende apenas da função de curvatura $f(r)$, isto

é, exclusivamente da coordenada radial r , resultando em:

$$\omega_{\theta}^{11} = \omega_{\theta}^{22} = 0, \quad (3.50)$$

$$\omega_{\theta}^{12} = 1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}, \quad (3.51)$$

$$\omega_{\theta}^{21} = - \left[1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \right]. \quad (3.52)$$

Esse comportamento reflete uma característica fundamental da geometria com simetria axial: apesar da dependência angular local das vierbeins, a curvatura efetiva experimentada pelos férmions, codificada na conexão de spin, é isotrópica em torno da origem e depende somente da distância radial. Isso está em plena concordância com a simetria do sistema e indica que a estrutura de gauge associada à curvatura preserva essa simetria, reforçando que os efeitos geométricos relevantes são puramente radiais. Assim, temos que:

$$\Omega_{\theta} = \frac{1}{2} \omega_{\theta}^{12} \gamma_1 \gamma_2 = \frac{1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}}{2} \gamma_1 \gamma_2. \quad (3.53)$$

Para construir a equação de Dirac em espaço-tempo curvo, é necessário expressar os operadores gama com índices curvos em termos das matrizes gama planas. Isso é feito por meio das vierbeins:

$$\gamma^r = e_1^r \gamma^1 + e_2^r \gamma^2, \quad (3.54)$$

$$\gamma^{\theta} = e_1^{\theta} \gamma^1 + e_2^{\theta} \gamma^2. \quad (3.55)$$

Substituindo as vierbeins calculados previamente, obtemos:

$$\gamma^r = (1 + \alpha f(r))^{-1/2} [\cos \theta \gamma^1 + \sin \theta \gamma^2], \quad (3.56)$$

$$\gamma^{\theta} = \frac{1}{r} [-\sin \theta \gamma^1 + \cos \theta \gamma^2]. \quad (3.57)$$

Explicitando os termos temporais e espaciais, a equação de Dirac sem massa se reescreve como:

$$i\hbar \gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar v_F \left[\gamma^r \partial_r + \gamma^{\theta} (\partial_{\theta} + \Omega_{\theta}) \right] \Psi. \quad (3.58)$$

Dessa forma, o Hamiltoniano efetivo que governa a dinâmica dos férmions em um espaço com curvatura axial é dado por:

$$\hat{H}_{\text{curved}} = -i\hbar v_F \left[\gamma^0 \gamma^r \partial_r + \gamma^0 \gamma^{\theta} \left(\partial_{\theta} + \frac{1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}}{2} \gamma_1 \gamma_2 \right) \right], \quad (3.59)$$

onde utilizamos a representação dada pela Eq. 3.39.

A partir dessas definições, os produtos $\gamma^0 \gamma^r$ e $\gamma^0 \gamma^{\theta}$ assumem as formas:

$$\gamma^0 \gamma^r = (1 + \alpha f(r))^{-1/2} [\cos \theta \sigma_1 - i \sin \theta \sigma_2], \quad (3.60)$$

$$\gamma^0 \gamma^\theta = -\frac{1}{r} [\sin \theta \sigma_1 + \cos \theta \sigma_2]. \quad (3.61)$$

Com isso, o Hamiltoniano efetivo assume uma forma matricial mais compacta:

$$H_{\text{curved}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta + A_\theta \\ (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta + A_\theta & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.62)$$

onde o termo adicional de gauge angular A_θ , que emerge da conexão de spin, é dado por:

$$A_\theta = \frac{1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}}{2r}. \quad (3.63)$$

Sabemos que A_θ pode ser interpretado como um pseudopotencial de Gauge, no sentido que sua origem é não-eletromagnética, mas devido à curvatura e ele está intimamente relacionado à conexão de spin. Desse modo, ele induz uma modificação no caminho das quasi-partículas, mas isso não é uma força externa real, mas sim um efeito geométrico.

4 DESCRIÇÃO GEOMÉTRICA DAS SUPERFÍCIES CURVAS.

Neste capítulo, apresentamos a descrição geométrica das superfícies curvas sobre as quais analisaremos a propagação de férmions de Dirac em uma folha de grafeno. O objetivo principal é compreender como a curvatura espacial influencia o comportamento quântico dos elétrons em sistemas bidimensionais com simetria axial.

Para isso, consideramos duas geometrias bidimensionais distintas, regulares (isto é, sem singularidades), com simetria axial e imersas em um espaço tridimensional, descritas convenientemente em coordenadas cilíndricas. As duas superfícies escolhidas possuem características topológicas semelhantes e correspondem a dois perfis distintos de deformação: uma superfície do tipo gaussiana e outra do tipo vulcão. Ambas são definidas por um perfil de elevação $z(r)$, com r representando a coordenada radial, e apresentam uma deformação localizada em torno da origem. Além disso, ambas são assintoticamente planas no plano (x, y) quando $r \rightarrow \infty$, o que significa que a curvatura está confinada a uma região finita do espaço. Essas deformações, também conhecidas na literatura como *ripples*, geram uma curvatura intrínseca na superfície, a qual modifica a métrica efetiva sentida pelos elétrons que se propagam sobre ela[13]. Para caracterizar geometricamente esses efeitos, introduzimos a função $f(r)$, que está diretamente relacionada à curvatura induzida, e calculamos o escalar de Ricci $R(r)$, o qual fornece uma medida escalar da curvatura local da superfície em cada ponto.

4.1 Superfície Gaussiana

A primeira superfície considerada é uma deformação suave com simetria axial descrita por um perfil gaussiano de elevação. A função $z(r)$ que define a superfície é dada por:

$$z(r) = Ae^{-\frac{r^2}{b^2}}, \quad (4.1)$$

em que A representa a altura máxima da deformação localizada na origem, enquanto o parâmetro b controla a largura da elevação. Essa forma funcional garante que a superfície seja mais elevada no centro ($r = 0$) e decaia suavemente em direção ao plano conforme $r \rightarrow \infty$, de modo que a curvatura esteja concentrada em uma região finita ao redor da origem.

A fim de obter a métrica induzida sobre a superfície, calculamos o termo diferencial associado à variação na altura, ou seja, a contribuição de dz^2 . A partir da função $z(r)$, temos:

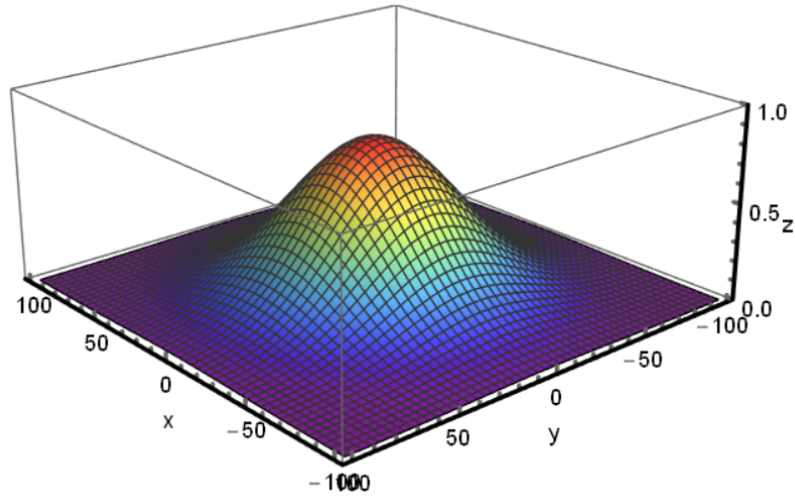
$$dz^2 = \left(\frac{dz}{dr}\right)^2 dr^2 = \frac{A^2}{b^4} \cdot 4r^2 \exp\left(-\frac{2r^2}{b^2}\right) dr^2, \quad (4.2)$$

ou, de forma equivalente, podemos reescrever:

$$dz^2 = \alpha f(r) dr^2 = 4 \frac{A^2}{b^2} \cdot \left(\frac{r^2}{b^2}\right) \exp\left(-\frac{2r^2}{b^2}\right) dr^2. \quad (4.3)$$

Com isso, é possível identificar a função $f(r)$, que quantifica a influência radial da curvatura na

Figura 8 – Representação da Superfície Gaussiana.



Elaborado pelo Autor.

métrica, como:

$$f(r) = 4 \left(\frac{r}{b} \right)^2 e^{-\frac{2r^2}{b^2}}. \quad (4.4)$$

4.2 Escalar de Ricci

O escalar de Ricci, ou escalar de curvatura, é definido como a contração do tensor de Ricci com a métrica do espaço:

$$R = g^{\mu\nu} R_{\mu\nu}, \quad (4.5)$$

e fornece uma medida escalar da curvatura intrínseca da superfície em cada ponto[75–78]. Em outras palavras, o escalar de Ricci quantifica o desvio local da geometria em relação à geometria plana. A importância de calcular $R(r)$ reside no fato de que ele resume, em uma única função escalar, como a geometria local da superfície se comporta, ou seja, se há regiões de curvatura positiva, negativa ou nula.

O cálculo do escalar de Ricci pode ser realizado a partir da definição do tensor de Ricci:

$$R_{\mu\nu} = R^\rho{}_{\mu\rho\nu} = \partial_\rho \Gamma^\rho_{\nu\mu} - \partial_\nu \Gamma^\rho_{\rho\mu} + \Gamma^\rho_{\rho\lambda} \Gamma^\lambda_{\nu\mu} - \Gamma^\rho_{\nu\lambda} \Gamma^\lambda_{\rho\mu}, \quad (4.6)$$

onde $\Gamma^\lambda_{\mu\nu}$ são os símbolos de Christoffel associados à métrica.

Para a superfície gaussiana em particular, a simetria do sistema permite simplificações consideráveis. Como a métrica é estática e não depende da coordenada angular θ , muitos termos se anulam, e o escalar de Ricci reduz-se a uma expressão simples em função da derivada da função $f(r)$:

$$R(r) = -\frac{\alpha f'(r)}{r [1 + \alpha f(r)]^2}. \quad (4.7)$$

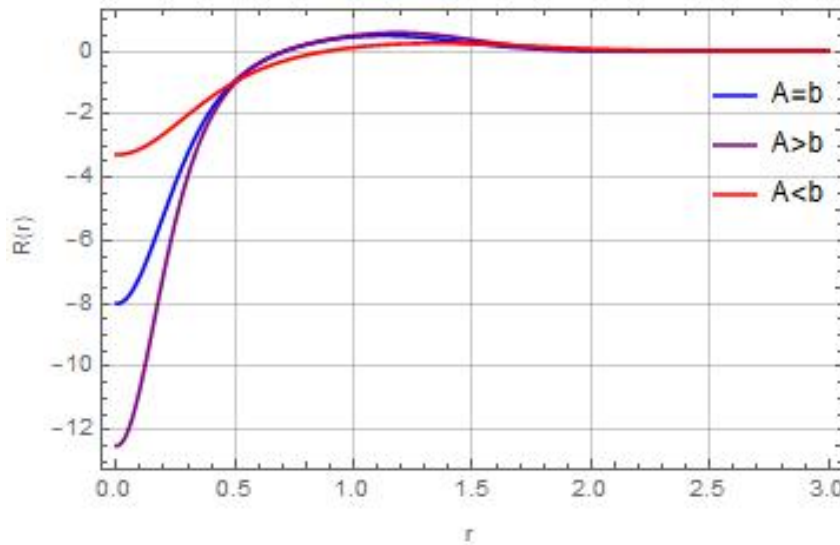
Essa expressão é válida não apenas para a superfície gaussiana, mas também para a superfície do tipo vulcão e, de modo geral, para qualquer geometria cuja métrica tenha a forma dado tipo $ds^2 = dt^2 - (1 + \alpha f(r))dr^2 - r^2 d\theta^2$.

No caso específico da superfície gaussiana, substituindo a função $f(r)$ correspondente nessa métrica e realizando as devidas manipulações algébricas, obtém-se a seguinte forma explícita para o escalar de Ricci:

$$R(r) = \frac{A^2 \left(\frac{2r^2}{8eb^2} r - \frac{2r^2}{16eb^2} \frac{r^3}{b^2} \right)}{b^2 r \left(1 + \frac{4A^2 e}{b^4} \cdot \frac{2r^2}{b^2} r^2 \right)^2} \quad (4.8)$$

A expressão do escalar de Ricci para a superfície gaussiana mostra explicitamente como a curvatura da superfície está relacionada à derivada radial da função $f(r)$, que por sua vez depende do perfil da deformação $z(r)$. O sinal negativo da Eq.4.7 indica que o escalar de Ricci será negativo nas regiões onde $f'(r) > 0$, o que é característico de uma curvatura negativa (tipo sela) ao redor da origem. Já em regiões onde $f'(r) < 0$, o escalar pode se tornar positivo, representando uma curvatura do tipo cúpula. O denominador $[1 + \alpha f(r)]^2$ assegura que, à medida que $r \rightarrow \infty$, onde $f(r) \rightarrow 0$, o escalar de Ricci tende a zero, recuperando a geometria plana.

Gráfico 1 – Escalar de curvatura para a saliência gaussiana.



Elaborado pelo Autor.

O gráfico 1 ilustra claramente esse comportamento: observamos um pequeno mergulho negativo em $r \approx 0$, seguido por um pico positivo próximo de $r \approx b/\sqrt{2}$, e então um decaimento exponencial de $R(r)$ para zero em grandes distâncias. O gráfico também evidencia como a razão A/b afeta a intensidade e a localização dessas regiões de curvatura: quando $A > b$, os valores absolutos do escalar de Ricci são mais acentuados, indicando uma curvatura mais forte; já quando $A < b$, a curvatura é mais suave. Dessa forma, o escalar de Ricci funciona como uma medida local precisa da curvatura induzida na folha de grafeno, revelando as regiões de deformação conforme a geometria da superfície.

4.3 Pseudopotencial de Gauge para a deformação gaussiana

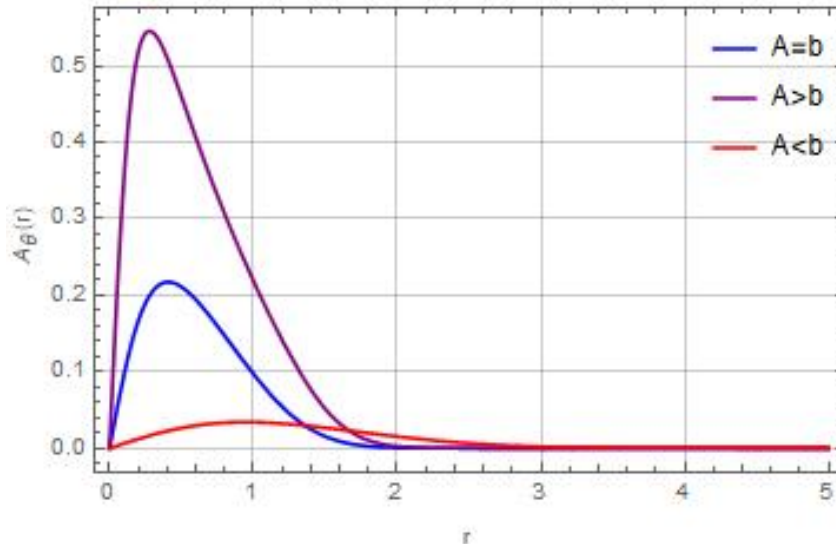
O pseudopotencial de Gauge A_θ surge na formulação da equação de Dirac para férmions em superfícies curvas, refletindo o acoplamento entre a geometria do espaço e os graus de liberdade dos elétrons do grafeno. Trata-se de um termo efetivo, de natureza geométrica, que aparece nos componentes da conexão de spin quando o Hamiltoniano é reescrito em coordenadas locais (vierbeins), simulando o efeito de um campo magnético externo sobre os férmions, mas originado exclusivamente da curvatura da superfície[13]. Por esse motivo, é denominado pseudopotencial de Gauge.

Fisicamente, esse potencial age como um campo magnético fictício, que pode influenciar significativamente a dinâmica eletrônica, induzindo estados ligados, efeitos de confinamento e alterações na densidade de estados. O termo “Gauge” se deve à analogia formal com os potenciais vetoriais do eletromagnetismo, já que ele entra no Hamiltoniano da mesma forma que um campo magnético real, mas tem origem puramente geométrica. Para o caso específico de uma deformação com perfil gaussiano, o pseudopotencial de Gauge associado pode ser expresso explicitamente como:

$$A_\theta(r) = \frac{1}{2r} \left[1 - \left(1 + \frac{4A^2 r^2}{b^4} e^{-2r^2/b^2} \right)^{-1/2} \right] \quad (4.9)$$

Essa expressão evidencia como a geometria local, codificada nos parâmetros A (amplitude) e b (largura da gaussiana), regula a intensidade e o perfil espacial do pseudocampo de Gauge.

Gráfico 2 – Comportamento do pseudopotencial de Gauge $A_\theta(r)$ para diferentes razões entre a amplitude A e o parâmetro de largura b da superfície gaussiana.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico 2, é apresentado o comportamento de $A_\theta(r)$ para a superfície com perfil gaussiano $z(r) = Ae^{-r^2/b^2}$, considerando diferentes razões entre a amplitude A e o parâmetro de largura b . Observa-se que o pseudopotencial é sempre nulo em $r = 0$, cresce até atingir um valor máximo e depois decai rapidamente para zero à medida que $r \rightarrow \infty$, refletindo a natureza localizada da curvatura da gaussiana.

É importante destacar que a intensidade e o alcance do pseudopotencial são fortemente modulados pela razão $\alpha = A^2/b^4$, que quantifica a curvatura efetiva da superfície. Quando $A > b$, ou seja, a amplitude é maior que a largura, a curvatura induzida pela gaussiana se torna mais intensa e concentrada, resultando em um pseudopotencial mais alto e mais localizado (curva roxa). Por outro lado, quando $A < b$, a gaussiana é mais “larga” e “baixa”, o que distribui a curvatura por uma região maior, tornando o campo efetivo mais fraco e menos acentuado (curva vermelha). Nesse caso, os efeitos geométricos sobre a dinâmica dos férmions são suavizados, e o sistema tende a se comportar de forma mais próxima ao plano.

4.4 Superfície Tipo Vulcão

Nesta seção, analisamos uma segunda geometria de interesse que, assim como a superfície gaussiana, apresenta simetria axial e uma deformação localizada. No entanto, essa nova configuração possui um perfil distinto, com elevação nula na origem, um pico máximo em uma região intermediária e decaimento suave para valores grandes de r . Essa morfologia se assemelha à de um vulcão, razão pela qual denominamos essa geometria de *superfície tipo vulcão*.

O perfil dessa superfície é descrito por uma função $z(r)$ dada por:

$$z(r) = A r e^{-\frac{r^2}{b^2}}, \quad (4.10)$$

em que A determina a altura característica da deformação, e b controla a largura da estrutura. Diferente da superfície gaussiana, onde a elevação é máxima na origem, a superfície tipo vulcão apresenta um ponto máximo em $r \neq 0$, mais especificamente em $r = b/\sqrt{2}$, como pode ser verificado ao derivar $z(r)$. Para $r \rightarrow 0$, a superfície apresenta uma elevação suave a partir da origem, com inclinação finita determinada pelo parâmetro A . Já para $r \rightarrow \infty$, o termo exponencial garante que $z(r) \rightarrow 0$, tornando a superfície assintoticamente plana no plano (x, y) , como se espera de uma deformação localizada.

Para obter a métrica induzida sobre essa superfície, devemos considerar a contribuição da variação em z , ou seja, calcular dz^2 . Derivando a função $z(r)$, obtemos:

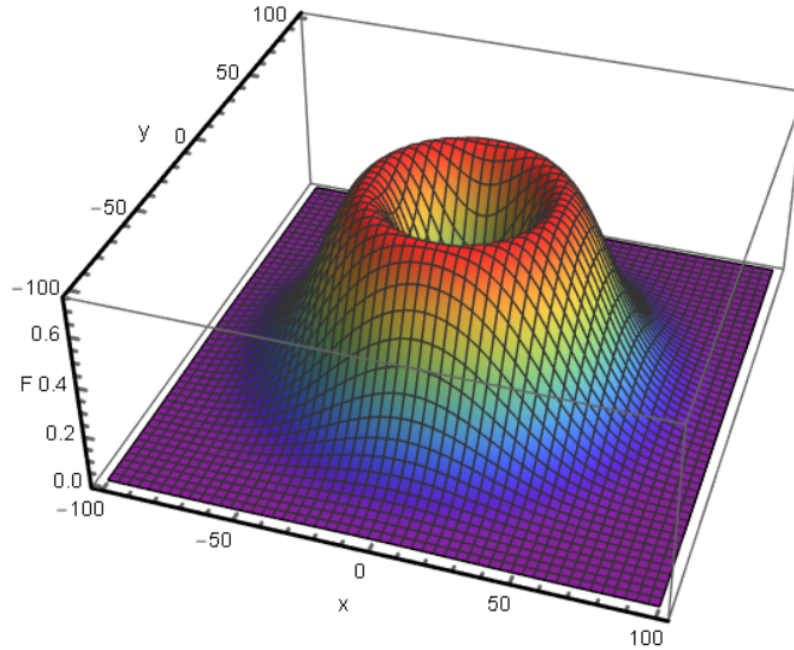
$$\frac{dz}{dr} = A e^{-\frac{r^2}{b^2}} \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right), \quad (4.11)$$

de modo que o termo diferencial ao longo da coordenada radial associado à elevação fica:

$$dz^2 = \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 dr^2 = A^2 e^{-\frac{2r^2}{b^2}} \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)^2 dr^2. \quad (4.12)$$

A curvatura induzida pela deformação da superfície tipo vulcão afeta diretamente a geometria do espaço sobre o qual os férmions se propagam, produzindo uma modificação efetiva na métrica que pode ser interpretada como uma dilatação ou compressão da direção radial. Assim como no caso da superfície gaussiana, essa deformação geométrica é incorporada à métrica por meio do termo diferencial dz^2 , que pode ser reescrito na forma $dz^2 = \alpha f(r) dr^2$. A função $f(r)$ caracteriza a intensidade e a forma da curvatura radial resultante da deformação

Figura 9 – Representação da superfície em forma de vulcão discutida no texto.



Elaborado pelo Autor.

e, para a superfície tipo vulcão, é dada por:

$$f(r) = \left(1 - \frac{2r^2}{b^2}\right)^2 \cdot b^2 \cdot e^{-\frac{2r^2}{b^2}}. \quad (4.13)$$

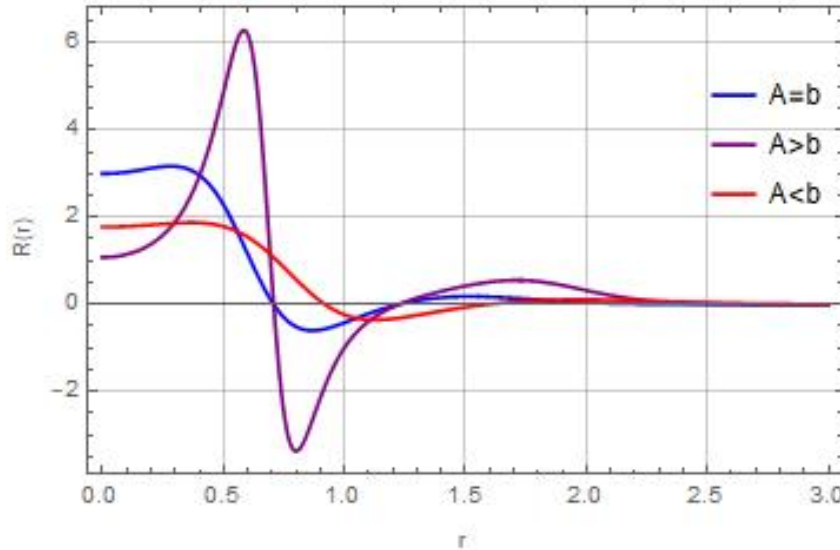
Essa função possui um comportamento qualitativamente distinto daquele encontrado para a superfície gaussiana. Em particular, o fator $\left(1 - \frac{2r^2}{b^2}\right)^2$ faz com que $f(r)$ não seja monotônica: ela pode assumir valores máximos, mínimos e até nulos dependendo do raio r , indicando que a curvatura da superfície muda de sinal em diferentes regiões. Essa variação implica que a direção radial é alternadamente esticada ou contraída, conforme o elétron se move na superfície, o que configura uma modulação geométrica mais rica. Tais características influenciam diretamente a dinâmica dos férmions em grafeno, afetando tanto a forma das soluções da equação de Dirac quanto as propriedades físicas observáveis, como a densidade de probabilidade e o espectro de energia. Em particular, essa variação da curvatura pode atuar como um potencial efetivo com regiões atrativas e repulsivas, alterando significativamente o comportamento dos elétrons.

4.5 Escalar de Ricci para o vulcão

Como discutido anteriormente, a expressão para o escalar de curvatura dada na Eq. 4.7 é válida para qualquer superfície com simetria axial, independentemente do perfil específico adotado para a deformação. Ao substituirmos a função $f(r)$, que caracteriza a geometria radial da superfície, pela expressão correspondente ao caso da superfície do tipo vulcão, obtemos:

$$R(r) = \frac{A^2 \left(-8e^{\frac{2r^2}{b^2}} r \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right) - 4e^{\frac{2r^2}{b^2}} r \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)^2 \right)}{b^2 r \left(1 + A^2 e^{\frac{2r^2}{b^2}} \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)^2 \right)^2}. \quad (4.14)$$

Gráfico 3 – Escalar de Ricci para a superfície do tipo vulcão.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico 3, observa-se o comportamento do escalar de curvatura $R(r)$ associado à superfície do tipo vulcão. Nota-se que, para valores pequenos de r , isto é, próximos ao centro da deformação (região da “cratera”), o escalar de curvatura apresenta um *pico positivo*, evidenciando uma curvatura positiva localizada na vizinhança da origem. À medida que r aumenta, $R(r)$ decresce, atinge um mínimo negativo e, posteriormente, tende assintoticamente a zero para $r \rightarrow \infty$. Esse comportamento é qualitativamente distinto daquele observado no caso da superfície gaussiana, onde o escalar de curvatura apresenta um decaimento suave e monótono. Aqui, a presença de um máximo seguido de um mínimo indica a existência de pontos de inflexão no perfil da função $z(r)$, o que implica mudanças no sinal da concavidade da superfície.

Fisicamente, isso significa que a superfície do tipo vulcão possui regiões alternadas de curvatura positiva e negativa, o que a torna uma geometria mais rica e interessante do ponto de vista da física do grafeno. Essas transições de concavidade podem, por exemplo, gerar efeitos localizados de confinamento ou espalhamento dos férmions de Dirac. Além disso, o fato de que $R(r) \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$ é coerente com a natureza localizada da deformação: a influência geométrica da curvatura se restringe a uma vizinhança próxima ao centro da superfície, sendo praticamente desprezível a grandes distâncias, onde a folha de grafeno recupera seu caráter plano.

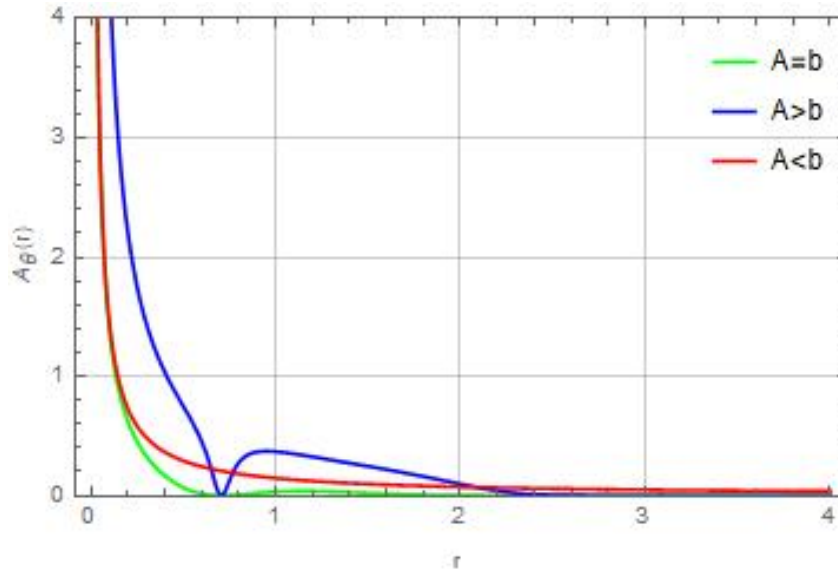
4.6 Pseudopotencial de Gauge para a superfície tipo vulcão

Podemos agora analisar o comportamento do pseudopotencial de Gauge $A_\theta(r)$ associado à nova geometria tipo vulcão. A partir da Eq. 3.63, obtemos a seguinte expressão analítica para o potencial:

$$A_\theta(r) = \frac{1}{2r} \left[1 - \left(1 + A^2 e^{-2r^2/b^2} \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)^2 \right)^{-1/2} \right]. \quad (4.15)$$

Essa expressão reflete o acoplamento entre a curvatura da superfície e o comportamento efetivo dos férmions em grafeno, que sentem esse termo como um campo magnético fictício. Ao contrário do caso da geometria gaussiana, onde $A_\theta(r) \rightarrow 0$ suavemente quando $r \rightarrow 0$, o comportamento do pseudopotencial no perfil tipo vulcão é significativamente diferente.

Gráfico 4 – Pseudopotencial de Gauge $A_\theta(r)$ para diferentes razões entre a amplitude A e o parâmetro de largura b da superfície tipo vulcão.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Como mostrado no gráfico4, $A_\theta(r)$ diverge para $r \rightarrow 0$ em todos os casos considerados. Esse comportamento singular indica que a curvatura local se concentra fortemente na região central da superfície, gerando um campo efetivo intenso na vizinhança da origem. Tal divergência do pseudopotencial pode ter importantes implicações físicas, como o surgimento de estados ligados fortemente localizados ou barreiras efetivas que impedem o acesso à região central.

Além disso, o gráfico evidencia que o perfil de $A_\theta(r)$ depende sensivelmente da razão entre a amplitude A e o parâmetro de largura b . Quando $A > b$ (curva azul), observa-se um máximo secundário após a divergência inicial, sugerindo a presença de uma estrutura de campo mais complexa, com regiões de reforço e enfraquecimento do pseudocampo ao longo do raio. Para $A = b$ (curva verde), esse máximo ainda está presente, porém com menor intensidade. Já no regime de interesse físico deste trabalho, onde $A < b$ (curva vermelha), o pseudopotencial,

embora ainda divergente na origem, decai de forma mais suave e monotôna, sem apresentar um máximo secundário pronunciado.

Esse comportamento reforça a sensibilidade do sistema às características geométricas da deformação. A forma como a curvatura se distribui ao longo da superfície determina diretamente a intensidade e a forma espacial do pseudopotencial de Gauge. Conforme discutido anteriormente, a razão $\alpha = A^2/b^4$ continua sendo o parâmetro-chave que controla a curvatura efetiva da superfície e, conseqüentemente, o perfil de $A_\theta(r)$.

Ressaltamos que, a partir deste ponto, todos os resultados serão apresentados considerando o regime onde $A < b$, que é o de maior interesse físico no contexto deste estudo. Esse regime representa superfícies mais suaves e com curvatura distribuída de forma menos concentrada, sendo mais compatíveis com deformações realizáveis experimentalmente em folhas de grafeno.

5 DINÂMICA DE FÉRMIONS EM SUPERFÍCIES CURVAS: ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE GEOMETRIAS GAUSSIANA E VULCÂNICA

Neste capítulo, investigamos a dinâmica de férmions de Dirac sobre superfícies curvas com simetria axial, utilizando uma abordagem comparativa entre duas geometrias específicas: a superfície gaussiana e a superfície tipo vulcão. Ambas as superfícies representam deformações localizadas em uma folha de grafeno, mas possuem diferentes características de curvatura, o que permite uma análise rica sobre como a geometria influencia o comportamento dos elétrons.

Nosso objetivo principal consiste em, partindo da equação de autovalores e autovetores associada ao Hamiltoniano efetivo previamente derivado, obter uma equação diferencial que descreva a evolução radial das componentes do espinor. A partir dessa equação, analisaremos qualitativamente e quantitativamente como a curvatura afeta a dinâmica eletrônica, investigando, por exemplo, a presença de estados ligados ou de espalhamento, a estrutura do espectro de energia, e o perfil da densidade de probabilidade nas diferentes subredes do grafeno.

A fim de simplificar o desenvolvimento analítico, introduzimos a função auxiliar $F(r)$, definida como:

$$F(r) = (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.1)$$

Com essa definição, podemos reescrever os operadores diferenciais atuantes no Hamiltoniano. Definimos os operadores $\hat{\Lambda}$ e $\hat{\Lambda}^\dagger$, que contêm explicitamente os efeitos da curvatura e do potencial de gauge induzido, da seguinte forma:

$$\hat{\Lambda} = F(r)\partial_r + \frac{i}{r}\partial_\theta + A_\theta, \quad (5.2)$$

e

$$\hat{\Lambda}^\dagger = F(r)\partial_r - \frac{i}{r}\partial_\theta + A_\theta. \quad (5.3)$$

Com esses operadores, o Hamiltoniano de Dirac em espaço curvo, conforme apresentado anteriormente na Eq. 3.62, pode ser reescrito de forma compacta como:

$$H_{\text{curved}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & \Lambda \\ \Lambda^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.4)$$

5.1 Soluções Estacionárias e Redução Radial da Equação de Dirac

Para compreender a influência da curvatura sobre os elétrons em uma folha de grafeno, é fundamental analisar como a geometria da superfície modifica os estados quânticos acessíveis ao sistema. Como estamos lidando com férmions de Dirac sem massa em uma superfície bidimensional com simetria axial, o comportamento dinâmico dos elétrons pode ser estudado a partir da equação de Dirac generalizada, que neste caso assume a forma de uma equação de autovalores e autovetores. Em nosso contexto, o Hamiltoniano efetivo \hat{H}_{curved} ,

que já incorpora os efeitos da curvatura por meio da métrica, do campo de gauge $A_\theta(r)$ e da função $F(r)$, atua sobre um espinor de duas componentes. Assim, o problema físico se reduz à resolução da seguinte equação de autovalores:

$$\hat{H}_C \Psi(r, \theta) = E \Psi(r, \theta). \quad (5.5)$$

Devido à simetria axial da superfície curva considerada, o sistema apresenta invariância sob rotações em torno do eixo z . Essa simetria garante a conservação da componente z do momento angular total, que, no contexto da equação de Dirac em duas dimensões, deve levar em conta tanto o momento angular orbital quanto o pseudo-spin associado ao espinor de duas componentes. O operador correspondente ao momento angular total na direção z é dado por:

$$\hat{J}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (5.6)$$

onde o primeiro termo representa o momento angular orbital e o segundo termo corresponde à contribuição do pseudo-spin, com σ_z sendo a matriz de Pauli associada ao spin efetivo das componentes do espinor. Esse operador comuta com o Hamiltoniano efetivo \hat{H}_{curved} derivado para a superfície curva:

$$[\hat{H}_{\text{curved}}, \hat{J}_z] = 0, \quad (5.7)$$

o que implica que os dois operadores possuem um conjunto comum de autovetores.

A conservação de \hat{J}_z nos permite escrever a função de onda com dependência angular fatorada como um termo de fase comum:

$$\Psi(r, \theta, t) = e^{im\theta} e^{-iEt/\hbar} \begin{pmatrix} \psi_A(r) \\ \psi_B(r) \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

onde as componentes radiais $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$ são, em geral, distintas, mas compartilham a mesma dependência angular global.

A separação explícita das variáveis radiais e angulares na função de onda, expressa na Eq. 5.8 permite que a derivada em θ , presente nos operadores diferenciais do Hamiltoniano, seja substituída diretamente por im . Isso ocorre porque a fase $e^{im\theta}$ é comum a ambas as componentes do espinor, e sua derivada angular resulta em um fator multiplicativo constante. Como consequência, a equação de Dirac, originalmente formulada em termos de derivadas parciais nas coordenadas (r, θ) , é reduzida a um sistema de equações diferenciais ordinárias que depende apenas da coordenada radial r .

Essa simplificação transforma o problema bidimensional em um sistema efetivamente unidimensional ao longo da direção radial, sem perder as contribuições físicas associadas à curvatura da superfície. A complexidade geométrica permanece codificada nos termos radiais do Hamiltoniano, especialmente nas funções $F(r)$ e $A_\theta(r)$, que incorporam os efeitos da métrica e da conexão de spin associadas à deformação da superfície.

5.2 Densidade de probabilidade para um espinor

Para preservar a interpretação probabilística da mecânica quântica no contexto dos férmions de Dirac em grafeno, é essencial garantir a conservação da norma do pseudoespinor

ao longo do tempo. Isso assegura que a densidade de probabilidade permaneça bem definida e que o sistema possa ser descrito dentro da estrutura do espaço de Hilbert [79–81].

Consideramos o pseudoespinoir bidimensional no plano do grafeno, já com a separação das variáveis angulares, como:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_A(r)e^{im\theta} \\ \psi_B(r)e^{im\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

onde $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$ são funções apenas da coordenada radial r , e o fator $e^{im\theta}$ reflete a simetria rotacional do sistema.

A densidade de probabilidade associada a esse pseudoespinoir é dada por:

$$\rho(\mathbf{r}, \theta) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \theta)\Psi(\mathbf{r}, \theta). \quad (5.10)$$

Calculando o conjugado hermitiano de Ψ , obtemos:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \left(\psi_A^*(r)e^{-im\theta} \quad \psi_B^*(r)e^{-im\theta} \right), \quad (5.11)$$

de modo que, ao multiplicar, os fatores angulares se cancelam, resultando em uma densidade de probabilidade puramente radial:

$$\rho(r) = |\psi_A(r)|^2 + |\psi_B(r)|^2. \quad (5.12)$$

Para que o estado representado por $\Psi(\mathbf{r})$ seja fisicamente admissível, ele deve pertencer a um espaço de Hilbert apropriado. Formalmente, o *espaço de Hilbert* é um espaço vetorial complexo com produto interno, completo em relação à norma induzida por esse produto. No presente caso, o espaço relevante é $L^2(R^2) \otimes C^2$, ou seja, o conjunto dos pseudoespinores quadrado-integráveis definidos no plano R^2 , com valores em C^2 [82–84].

A condição de normalização exige que a integral da densidade de probabilidade sobre toda a superfície seja igual a 1:

$$\int_{R^2} \rho(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = \int_{R^2} (|\psi_A(r)|^2 + |\psi_B(r)|^2) d^2\mathbf{r} = 1. \quad (5.13)$$

Em coordenadas polares, o elemento de área é dado por $d^2\mathbf{r} = r dr d\theta$, e a condição de normalização assume a forma:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} (|\psi_A(r)|^2 + |\psi_B(r)|^2) r d\theta dr = 1. \quad (5.14)$$

Essa condição garante que a probabilidade total de encontrar o elétron em qualquer ponto do plano do grafeno seja unitária, independentemente de estar no sublattice A ou B. No contexto do grafeno, $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$ representam as amplitudes de probabilidade associadas à presença do elétron nas subredes A ou B, respectivamente. Assim, a densidade $|\psi_A(r)|^2$ corresponde à contribuição da componente do pseudoespinoir localizada nos átomos do sublattice A, enquanto $|\psi_B(r)|^2$ representa a contribuição da componente associada ao sublattice B. A soma dessas densidades fornece a probabilidade total de detecção do elétron em uma vizinhança infinitesimal ao redor do ponto r , refletindo a natureza bipartida da rede de grafeno e o papel

fundamental do pseudoespinor na descrição da dinâmica dos elétrons.

5.3 Desacoplamento do Espinor: Equações diferenciais para ψ_A e ψ_B

Com todas essas considerações, podemos agora reescrever a equação de autovalores e autovetores de forma compacta, utilizando os operadores $\hat{\Lambda}$ e $\hat{\Lambda}^\dagger$ definidos anteriormente. A equação de Dirac no espaço curvo torna-se:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\Lambda} \\ -i\hat{\Lambda}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A e^{im\theta} \\ \psi_B e^{im\theta} \end{pmatrix} = \frac{E}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} \psi_A e^{im\theta} \\ \psi_B e^{im\theta} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

A equação acima resulta no seguinte sistema de equações acopladas:

$$\begin{cases} -i\hat{\Lambda}(\psi_B e^{im\theta}) = \frac{E}{\hbar v_F} \psi_A e^{im\theta} \\ -i\hat{\Lambda}^\dagger(\psi_A e^{im\theta}) = \frac{E}{\hbar v_F} \psi_B e^{im\theta} \end{cases} \quad (5.16)$$

Essas equações revelam o acoplamento entre as componentes ψ_A e ψ_B , refletindo a interdependência entre as subredes A e B da estrutura de grafeno. Esse acoplamento é uma característica fundamental dos férmions de Dirac em grafeno e indica, desde já, que os elétrons não estão restritos a uma única subrede. A dinâmica completa só pode ser compreendida considerando ambas as componentes simultaneamente.

A equação de Dirac derivada anteriormente nos conduziu a um sistema de equações acopladas entre as componentes ψ_A e ψ_B do espinor. Para aprofundar a análise e obter equações diferenciais que descrevam de forma independente a evolução radial de cada componente, é necessário proceder ao desacoplamento dessas equações.

O objetivo desta seção é justamente reescrever o sistema de equações de modo que se obtenham expressões diferenciais de segunda ordem separadas para ψ_A e ψ_B . Para isso, partimos da primeira equação do sistema (5.16), isolando $\psi_B e^{im\theta}$ em função de $\psi_A e^{im\theta}$. Isso nos fornece:

$$\psi_B e^{im\theta} = \frac{-i\hbar v_F}{E} \hat{\Lambda}^\dagger(\psi_A e^{im\theta}). \quad (5.17)$$

Em seguida, substituímos essa expressão na segunda equação do sistema, o que permite eliminar ψ_B da equação e obter uma equação que envolve apenas ψ_A . O resultado dessa substituição é:

$$-\hat{\Lambda} \left(\frac{\hbar v_F}{E} \hat{\Lambda}^\dagger(\psi_A e^{im\theta}) \right) = \frac{E}{\hbar v_F} \psi_A e^{im\theta}. \quad (5.18)$$

Simplificando os fatores constantes e reorganizando os termos, obtemos uma equação diferencial de segunda ordem para ψ_A :

$$-\hat{\Lambda}(\hat{\Lambda}^\dagger(\psi_A e^{im\theta})) = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_A e^{im\theta}. \quad (5.19)$$

Neste ponto, é conveniente introduzir uma notação auxiliar que explicita a dependência angular de forma separada, a fim de tornar os operadores mais fáceis de manipular. Para isso, definimos:

$$\phi(\theta) = \phi_A(\theta) = \phi_B(\theta) = e^{im\theta}. \quad (5.20)$$

Com essa definição, podemos tratar a função de onda $\psi_A(r)e^{im\theta}$ como o produto $\psi_A(r)\phi(\theta)$, permitindo uma aplicação mais clara dos operadores diferenciais sobre cada variável. Nos próximos passos, essa separação será essencial para aplicar explicitamente os operadores $\hat{\Lambda}$ e $\hat{\Lambda}^\dagger$ sobre as funções e extrair a equação radial efetiva. Definida tal função, temos então

$$-\hat{\Lambda} \left[\hat{\Lambda}^\dagger (\psi_A \phi(\theta)) \right] = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_A \phi(\theta). \quad (5.21)$$

Primeiro vamos aplicar o operador $\hat{\Lambda}^\dagger$ sobre as funções. Fazendo isso, obtemos a seguinte relação:

$$\hat{\Lambda}^\dagger (\psi_A \phi(\theta)) = \left[F(r) \partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta + A_\theta \right] (\psi_A \phi(\theta)), \quad (5.22)$$

que leva à

$$\hat{\Lambda}^\dagger (\psi_A \phi(\theta)) = F(r) \phi(\theta) \psi'_A - \frac{i}{r} \psi_A \phi'(\theta) + A_\theta \psi_A \phi(\theta). \quad (5.23)$$

Dado que conhecemos como o operador $\hat{\Lambda}^\dagger$ atua nas funções, agora queremos saber como o operador $\hat{\Lambda}$ atua na Eq.(5.23). Temos então que ao aplicarmos o operador, obtemos

$$\begin{aligned} & -\hat{\Lambda} \left[F(r) \phi(\theta) \psi'_A - \frac{i}{r} \psi_A \phi'(\theta) + A_\theta \psi_A \phi(\theta) \right] \\ &= - \left[F(r) \partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta + A_\theta \right] \left[F(r) \phi(\theta) \psi'_A - \frac{i}{r} \psi_A \phi'(\theta) + A_\theta \psi_A \phi(\theta) \right]. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Ajustando os termos chegamos à

$$\begin{aligned} -\hat{\Lambda} \left[\hat{\Lambda}^\dagger (\psi_A \phi(\theta)) \right] &= -F^2(r) \phi(\theta) \psi''_A - [F(r) F'(r) \phi(\theta) + 2F(r) \phi(\theta) A_\theta] \psi'_A \\ &\quad - \left[\frac{i}{r^2} F(r) \phi'(\theta) + F(r) \phi(\theta) A'_\theta + \frac{1}{r^2} \phi''(\theta) + A_\theta^2 \phi(\theta) \right] \psi_A. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Dado que conhecemos $\phi(\theta)$, temos que suas derivadas são explicitamente expressas por

$$\phi'(\theta) = im\phi(\theta), \quad (5.26)$$

e

$$\phi''(\theta) = -m^2 \phi(\theta). \quad (5.27)$$

Portanto,

$$-\hat{\Lambda} \left[\hat{\Lambda}^\dagger (\psi_A \phi(\theta)) \right] = -\phi(\theta) \left\{ F^2(r) \psi''_A + F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi'_A \right. \quad (5.28)$$

$$+ \left[F(r)A'_\theta - \frac{m}{r^2} (F(r) + m_A) + A_\theta^2 \right] \psi_A \Bigg\}.$$

Vamos guardar esse resultado a priori e vamos voltar à Eq.(5.16).

Queremos agora encontrar uma expressão semelhante para ψ_B . Note que ao isolar ψ_A encontramos a seguinte relação:

$$\psi_A e^{im\theta} = \frac{-i\hbar v_F}{E} \hat{\Lambda}(\psi_B e^{im\theta}). \quad (5.29)$$

Assim temos uma equação inteiramente desacoplada para ψ_B :

$$-\hat{\Lambda}^\dagger \left[\hat{\Lambda}(\psi_B e^{im\theta}) \right] = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_B e^{im\theta}. \quad (5.30)$$

Temos que

$$\begin{aligned} -\hat{\Lambda}^\dagger \left[\hat{\Lambda}(\psi_B \phi(\theta)) \right] &= - \left[F(r) \partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta + A_\theta \right] \\ &\cdot \left[F(r) \phi(\theta) \psi'_B + \frac{i}{r} \psi_B \phi'(\theta) + A_\theta \psi_B \phi(\theta) \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Distribuindo cuidadosamente os termos e realizando passos semelhante ao que foi feito anteriormente, obtemos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} -\hat{\Lambda}^\dagger \left[\hat{\Lambda}(\psi_B \phi(\theta)) \right] &= -F^2(r) \phi(\theta) \psi''_B - \phi(\theta) F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi'_B \\ &- \phi(\theta) \left[F(r) A'_\theta + \phi(\theta) - \frac{m}{r^2} (m - F(r)) + A_\theta^2 \right] \psi_B. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Consideremos agora as Eqs.(5.28) e (5.32), combinando elas às Eqs. (5.21) e (5.30) respectivamente, obtemos:

$$\begin{aligned} -F^2(r) \psi''_A - F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi'_A - \left[F(r) A'_\theta - \frac{m}{r^2} (m + F(r)) + A_\theta^2 \right] \psi_A \\ = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_A. \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} -F^2(r) \psi''_B - F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi'_B - \left[F(r) A'_\theta - \frac{m}{r^2} (m - F(r)) + A_\theta^2 \right] \psi_B \\ = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_B. \end{aligned} \quad (5.34)$$

As equações acima correspondem a Equações diferenciais de segunda ordem lineares, no entanto, dada a forma conhecida de $F(r)$, elas não são tão triviais e desse modo, não possuem uma solução analítica. Se quisermos de fato, conhecer o comportamento das funções ψ_A e ψ_B , devemos recorrer a métodos aproximativos para investigar as informações que essas

funções carregam.

Primeiro, sabemos que no grafeno, os estados próximos ao nível de Fermi, têm energias lineares $E = \pm \hbar v_f |\kappa|$, onde κ é o vetor de onda. Temos que κ se relaciona com o momento do elétron da também de forma linear, $p = \hbar \kappa$. Desse modo,

$$\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} = \kappa^2. \quad (5.35)$$

Diante disso, podemos reescrever as equações diferenciais encontradas como

$$F^2(r) \psi_A'' + F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi_A' + [F(r) A_\theta' - \frac{m}{r^2} (m + F(r)) + A_\theta^2] \psi_A = -\kappa^2 \psi_A. \quad (5.36)$$

$$F^2(r) \psi_B'' + F(r) [F'(r) + 2A_\theta] \psi_B' + \left[F(r) A_\theta' - \frac{m}{r^2} (m - F(r)) + A_\theta^2 \right] \psi_B = -\kappa^2 \psi_B. \quad (5.37)$$

5.4 Soluções via métodos aproximativos

Vimos anteriormente que, ao acoplar a equação de Dirac a uma métrica que descreve uma curvatura intrínseca, obtemos um sistema de equações acopladas envolvendo as componentes do espinor Ψ . Após o procedimento de desacoplamento, essas equações foram reduzidas a duas equações diferenciais lineares de segunda ordem para as componentes radiais $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$, conforme as Eqs. (5.36) e (5.37). Essas equações, no entanto, são de difícil resolução analítica em sua forma completa, devido à presença de termos derivados da geometria curva do sistema. Assim, nesta seção, vamos explorar possíveis simplificações e aproximações que permitam encontrar soluções aproximadas viáveis.

5.5 Primeira aproximação: Velocidade de Fermi

A velocidade de Fermi no grafeno é da ordem de $v_F \sim 10^6$ m/s, um valor elevado, comparável ao de metais convencionais. Entretanto, o que torna o grafeno particularmente interessante não é apenas essa velocidade alta, mas o fato de que, próximo aos pontos de Dirac, sua relação de dispersão é linear: $E \propto |\vec{p}|$. Isso faz com que os elétrons se comportem como férmions de Dirac sem massa, obedecendo a uma equação efetiva análoga à equação de Dirac relativística, embora a velocidade característica do sistema não seja a da luz, mas sim v_F .

Apesar de v_F ser cerca de $1/300$ da velocidade da luz, a analogia com a relatividade especial permanece válida no nível da estrutura matemática da equação de movimento. A relatividade, nesse caso, é apenas uma analogia: ela aparece por causa da estrutura hexagonal do grafeno e da forma linear da relação entre energia e momento, não porque os elétrons estejam realmente se movendo em velocidades relativísticas ou sofrendo efeitos da teoria da relatividade de Einstein.

Quando, porém, o elétron percorre uma região curva do grafeno, como aquelas descritas por uma deformação intrínseca da superfície, a métrica do espaço plano é modificada, e isso se reflete diretamente em uma correção local na velocidade de Fermi. A geometria da superfície interfere na propagação dos elétrons, tornando a velocidade de Fermi uma função da

posição. De acordo com [13], essa velocidade efetiva pode ser expressa como:

$$\tilde{v}_F(r) = \frac{v_F}{\sqrt{1 + \alpha f(r)}} = F(r)v_F, \quad (5.38)$$

onde a função $F(r)$ codifica os efeitos da curvatura sobre a dinâmica dos elétrons. Essa função emerge naturalmente do fator métrico radial da superfície curva considerada, e modifica a equação de Dirac ao afetar os coeficientes de derivada radial. Em termos físicos, $F(r)$ indica como a curvatura da superfície afeta a velocidade de Fermi em cada ponto, ou seja, mostra como a velocidade dos elétrons muda de acordo com a geometria do grafeno.

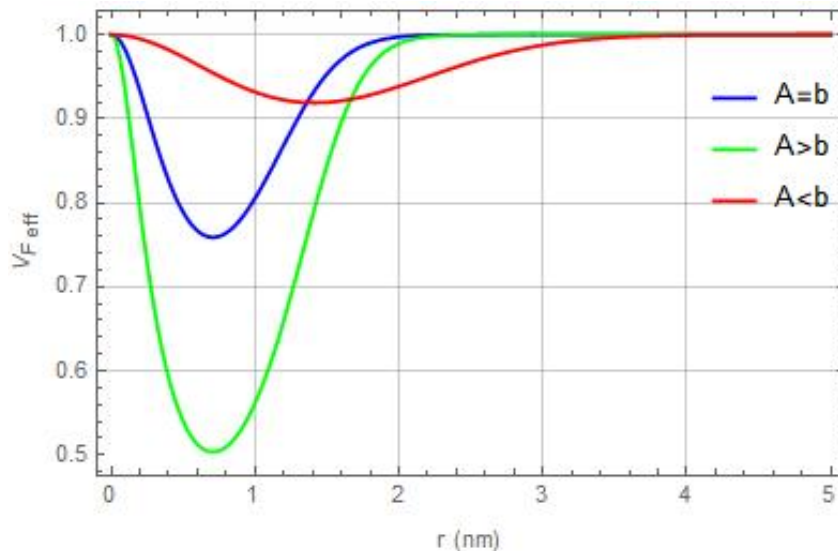
Apesar da importância conceitual dessa correção, é possível considerar um regime físico em que as variações locais na velocidade de Fermi são pequenas comparadas aos efeitos induzidos pelo pseudocampo de gauge A_θ . Esse campo efetivo também é gerado pela curvatura e desempenha papel central na dinâmica do espinor. Assim, como primeira aproximação, vamos assumir que a velocidade de Fermi é aproximadamente constante ao longo da superfície, o que equivale a tomar $F(r) \approx 1$. Com essa simplificação, as equações diferenciais para $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$ assumem uma forma mais tratável. Para a componente ψ_A , temos:

$$\psi_A''(r) + 2A_\theta(r)\psi_A'(r) + \left[A_\theta'(r) + A_\theta^2(r) - \frac{m}{r^2}(m+1)\right]\psi_A(r) = -\kappa^2\psi_A(r), \quad (5.39)$$

e, de maneira análoga, para ψ_B :

$$\psi_B''(r) + 2A_\theta(r)\psi_B'(r) + \left[A_\theta'(r) + A_\theta^2(r) - \frac{m}{r^2}(m-1)\right]\psi_B(r) = -\kappa^2\psi_B(r). \quad (5.40)$$

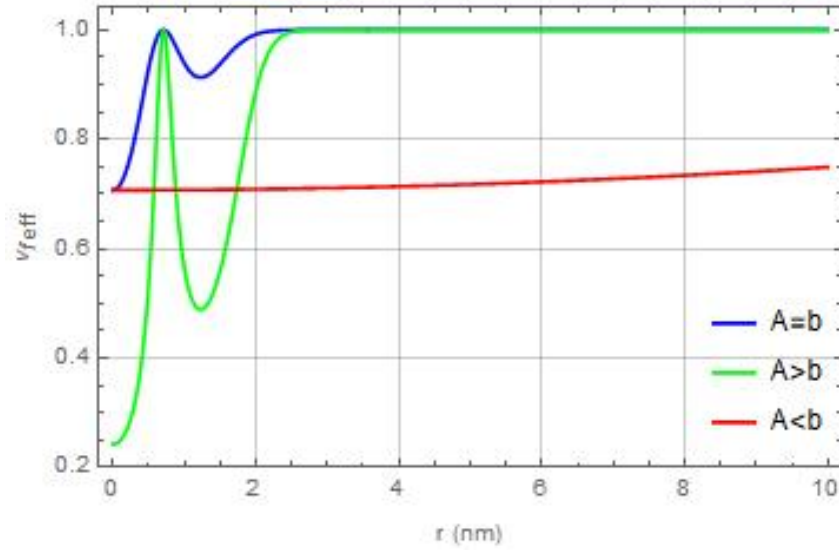
Gráfico 5 – Gráfico da velocidade de Fermi efetiva para superfície gaussiana.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir dos Gráficos 5 e 6, onde é exibido o comportamento da velocidade de Fermi efetiva para as duas superfícies em estudo, podemos avaliar a validade da aproximação $F(r) \approx 1$. Observa-se que, no caso da superfície gaussiana, quando $A < b$, a função $F(r)$

Gráfico 6 – Gráfico da velocidade de Fermi efetiva para superfície tipo vulcão.



Elaborado pelo autor.

apresenta apenas uma leve variação, permanecendo próxima de 1 ao longo de todo o domínio. Já no caso da superfície tipo vulcão, o mesmo comportamento ocorre quando $b > A$, com $F(r)$ se mantendo aproximadamente constante. Nesses dois regimes que estamos considerando para nossas análises, a influência da curvatura sobre a velocidade de Fermi é fraca, o que justifica a adoção da aproximação $F(r) \approx 1$ como ponto de partida. Mesmo sendo uma simplificação, essa aproximação preserva características essenciais do problema e nos permite extrair informações relevantes sobre a dinâmica dos elétrons em ambas as geometrias.

Partindo da suposição de que a variação da velocidade de Fermi efetiva é pequena em comparação com o pseudopotencial de gauge A_θ , podemos analisar como essa aproximação afeta a estrutura das equações no regime em que o parâmetro de curvatura $\alpha \ll 1$. Nesse caso, é possível expandir a função $F(r) = (1 + \alpha f(r))^{-1/2}$ em série de Taylor em torno de $\alpha = 0$:

$$F(\alpha, r) = F(0) + F'(0)\alpha + \frac{F''(0)}{2!}\alpha^2 + \frac{F'''(0)}{3!}\alpha^3 + \dots \quad (5.41)$$

Como $F(0) = 1$, e adotando uma aproximação de primeira ordem em α , obtemos:

$$F(r) \approx 1 - \frac{1}{2}\alpha f(r). \quad (5.42)$$

Essa aproximação será agora utilizada para simplificar a expressão do pseudopotencial de gauge efetivo. Lembrando que:

$$A_\theta(r) = \frac{1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}}{2r} = \frac{1 - F(r)}{2r}, \quad (5.43)$$

substituindo a expansão de $F(r)$, temos:

$$A_\theta(r) \approx \frac{1 - (1 - \frac{1}{2}\alpha f(r))}{2r} = \frac{\alpha f(r)}{4r}. \quad (5.44)$$

Portanto, no regime de curvatura fraca ($\alpha \ll 1$), o pseudocampo de gauge pode ser aproximado por:

$$A_\theta(r) \approx \frac{\alpha f(r)}{4r}. \quad (5.45)$$

Como será mostrado mais adiante, essa forma aproximada de A_θ simplificará significativamente os cálculos analíticos, permitindo o avanço nas soluções sem perda relevante de informações físicas.

5.6 Fase geométrica induzida pela curvatura: redefinindo ψ_A e ψ_B

Para simplificar as equações diferenciais obtidas anteriormente e destacar o papel da curvatura na função de onda do férmion, reescrevemos a solução para a componente radial do espinor como um produto funcional da forma:

$$\psi_A(r) = \mu(r) \chi_A(r). \quad (5.46)$$

Essa redefinição tem por objetivo separar a parte da solução que depende da fase geométrica associada à curvatura (contida em $\mu(r)$) da parte dinâmica (representada por $\chi_A(r)$).

As derivadas primeira e segunda de ψ_A são, respectivamente:

$$\psi'_A(r) = \mu'(r) \chi_A(r) + \mu(r) \chi'_A(r), \quad (5.47)$$

e

$$\psi''_A(r) = \mu''(r) \chi_A(r) + 2\mu'(r) \chi'_A(r) + \mu(r) \chi''_A(r). \quad (5.48)$$

Substituindo essas expressões na equação diferencial original, obtemos:

$$\mu'' \chi_A + 2A_\theta (\mu' \chi_A + \mu \chi'_A) + \lambda(r) \mu \chi_A = -\kappa^2 \mu \chi_A, \quad (5.49)$$

onde

$$\lambda(r) = A'_\theta + A_\theta^2 - \frac{m}{r^2}(m+1). \quad (5.50)$$

Reorganizando os termos, obtemos a seguinte equação para χ_A :

$$\chi''_A(r) + \left[\frac{2\mu'}{\mu} + 2A_\theta \right] \chi'_A(r) + \left[\frac{\mu''}{\mu} + 2A_\theta \frac{\mu'}{\mu} + \lambda(r) \right] \chi_A(r) = -\kappa^2 \chi_A(r). \quad (5.51)$$

Nosso objetivo é obter uma equação mais simples, semelhante a uma equação de tipo Klein-Gordon. Para isso, impomos a seguinte condição sobre $\mu(r)$:

$$\frac{\mu'(r)}{\mu(r)} = -A_\theta(r), \quad (5.52)$$

que, ao ser integrada, fornece:

$$\mu(r) = e^{-\int_0^r A_\theta(r') dr'}. \quad (5.53)$$

Essa função $\mu(r)$ pode ser interpretada como uma fase geométrica adquirida pelo férmion devido à curvatura da superfície. Na referência [85], J. E. G. Silva *et al.* em uma das seções do artigo, discutem como a equação de Dirac em uma superfície curva leva a uma fase geométrica

adquirida por uma partícula (férmion). Eles introduzem um operador de holonomia $U(\phi)$, que surge da conexão de Spin devido a curvatura. A fase adquirida pelo férmion ao longo do percurso está diretamente relacionada à geometria do espaço-tempo. Desse modo, isso pode ser entendido como um tipo de efeito Aharonov–Bohm geométrico impulsionado pela curvatura em vez do campo magnético.

A expressão que encontramos para $\mu(r)$ é muito semelhante ao operador de holonomia $U(\phi)$ da referência[85], mas agora aplicada a uma transformação radial ao invés de uma rotação angular ϕ . Desse modo, a função $\mu(r)$ é uma fase geométrica que modifica a função de onda do elétron devido à curvatura da folha de grafeno. Portanto, a folha de grafeno curvada modifica a fase de ψ_A e ψ_B , levando a um análogo do efeito Aharonov–Bohm geométrico.

Substituindo as derivadas de $\mu(r)$ na Eq. (5.51), obtemos:

$$\chi_A''(r) + [A_\theta^2 - A_\theta' - 2A_\theta^2 + \lambda(r)] \chi_A(r) = -\kappa^2 \chi_A(r). \quad (5.54)$$

O mesmo procedimento pode ser aplicado à componente $\psi_B(r)$, obtendo-se:

$$\chi_B''(r) + [A_\theta^2 - A_\theta' - 2A_\theta^2 + \Sigma(r)] \chi_B(r) = -\kappa^2 \chi_B(r), \quad (5.55)$$

onde

$$\Sigma(r) = A_\theta' + A_\theta^2 - \frac{m}{r^2}(m-1). \quad (5.56)$$

Substituindo explicitamente $\lambda(r)$ e $\Sigma(r)$ nas expressões, as equações diferenciais assumem a forma:

$$-\chi_A''(r) + \frac{m}{r^2}(m+1) \chi_A(r) = \kappa^2 \chi_A(r), \quad (5.57)$$

$$-\chi_B''(r) + \frac{m}{r^2}(m-1) \chi_B(r) = \kappa^2 \chi_B(r). \quad (5.58)$$

Observa-se que, no limite $r \rightarrow \infty$, os termos de potencial centrífugo desaparecem, e as soluções para χ_A e χ_B se comportam como ondas planas, o que é compatível com a interpretação física de partículas livres longe da região com curvatura.

5.7 Dinâmica do elétron na superfície gaussiana

Agora que dispomos das equações dinâmicas (Eqs. 5.57 e 5.58) juntamente com a função de fase geométrica $\mu(r)$, estamos em posição de analisar com mais profundidade o comportamento de um elétron sobre uma superfície curva. Em particular, vamos nos concentrar em duas geometrias: a superfície do tipo gaussiana e a do tipo vulcão. Nosso objetivo é investigar se há ou não a formação de estados ligados, se a curvatura funciona como uma barreira ou poço de potencial e em que medida o elétron é refletido ou transmitido ao interagir com a protuberância. Além disso, analisaremos como o momento angular m e a curvatura influenciam a dinâmica eletrônica, afetando, por exemplo, a distribuição de probabilidade de presença do elétron em cada sub-rede da estrutura de grafeno.

5.8 Potencial Efetivo

A partir das equações desacopladas para as componentes do espinor, emergem naturalmente termos que podem ser interpretados como potenciais efetivos. Esses termos não atuam diretamente como forças externas, mas representam as contribuições internas associadas ao momento angular e à curvatura da superfície, afetando o comportamento radial das soluções. Para compreendê-los com maior clareza, é útil distinguir entre dois tipos: os potenciais efetivos quadráticos, que aparecem no processo de desacoplamento das equações de Dirac, e os potenciais efetivos lineares, que surgem diretamente da estrutura dos operadores diferenciais presentes nas equações originais acopladas. Os potenciais efetivos quadráticos são dados por:

$$U_A^2(r) = \frac{m}{r^2}(m+1), \quad (5.59)$$

$$U_B^2(r) = \frac{m}{r^2}(m-1). \quad (5.60)$$

Esses termos decorrem diretamente da estrutura matemática das equações de segunda ordem obtidas após o desacoplamento das componentes do espinor. Eles representam potenciais centrífugos (repulsivos ou atrativos) associados ao momento angular orbital do elétron. Como se observa pelas expressões analíticas, esses potenciais efetivos quadráticos divergem como $1/r^2$ na vizinhança da origem. Tal comportamento é característico de sistemas com simetria radial e tem origem na contribuição do termo angular nas equações diferenciais.

Note que ao trocar o sinal de m (inverter o sentido do momento angular $m \rightarrow -m$), a função $U_A^2(r)$ se transforma em $U_B^2(r)$, e vice-versa. Essa assimetria é induzida pela curvatura: a curvatura do grafeno quebra a simetria entre estados com momento angular m . Desse modo, essas funções não são independentes, elas estão ligados por uma inversão do momento angular.

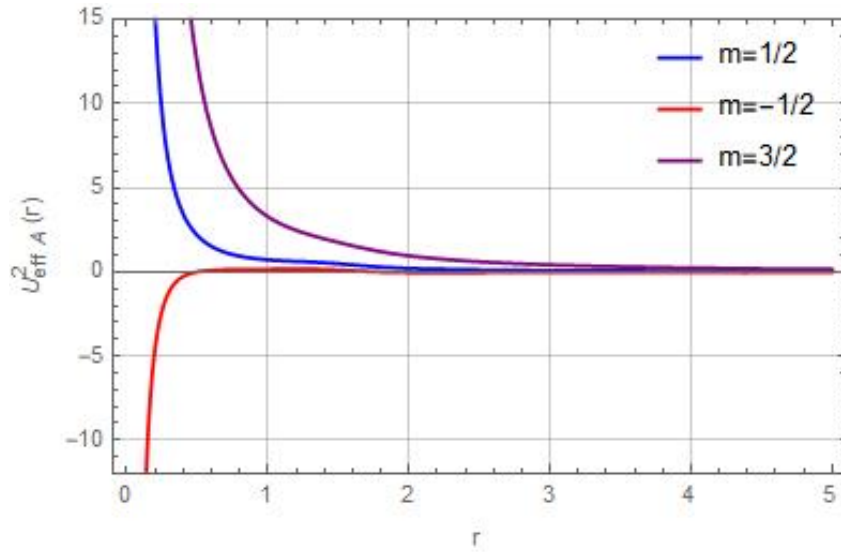
Nos Gráficos 7 e 8, que mostram $U_A^2(r)$ e $U_B^2(r)$ para diferentes valores de m , fica evidente que o caráter repulsivo ou atrativo do potencial depende do sinal e do módulo do momento angular. Para certos valores, como $m = -1/2$ em U_A^2 ou $m = 1/2$ em U_B^2 , o potencial assume valores negativos próximos à origem, caracterizando uma contribuição atrativa. Já para outros valores, os termos positivos indicam uma barreira centrífuga intensa que tende a afastar o elétron da região central.

Além disso, é importante destacar que, como as expressões de $U_A^2(r)$ e $U_B^2(r)$ dependem unicamente de m e de r , sua forma é universal e independe da curvatura específica da superfície. Ou seja, seja ela gaussiana ou do tipo vulcão, os gráficos desses potenciais efetivos quadráticos permanecem os mesmos, pois não envolvem explicitamente o pseudo-potencial de gauge $A_\theta(r)$, que é sensível à geometria da superfície.

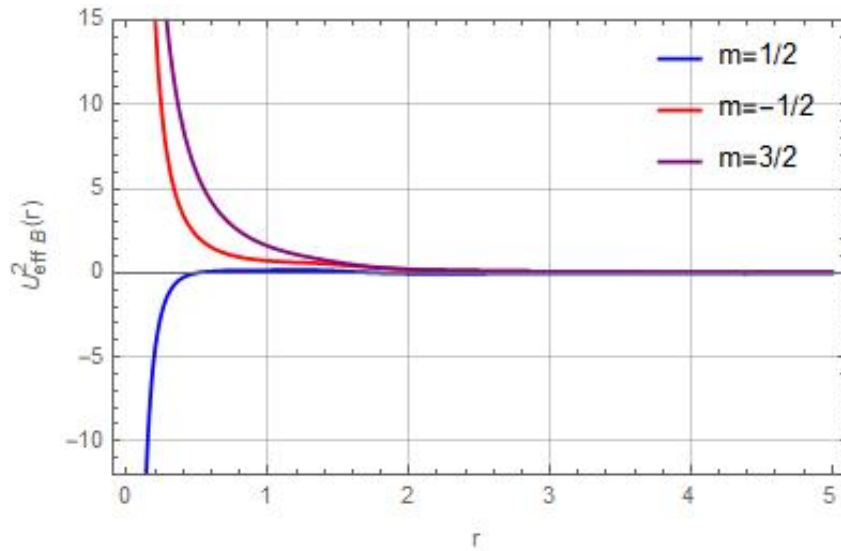
Por outro lado, ao manter as equações de Dirac acopladas, mas reescrevê-las em termos de operadores diferenciais compactos, obtemos os chamados potenciais efetivos lineares:

$$D_- = F(r) \frac{d}{dr} + U_A(r), \quad (5.61)$$

$$D_+ = F(r) \frac{d}{dr} + U_B(r), \quad (5.62)$$

Gráfico 7 – U_A^2 para diferentes valores de m .

Elaborado pelo Autor.

Gráfico 8 – U_B^2 para diferentes valores de m .

Elaborado pelo Autor.

com

$$U_A(r) = -\frac{m}{r} + A_\theta(r), \quad (5.63)$$

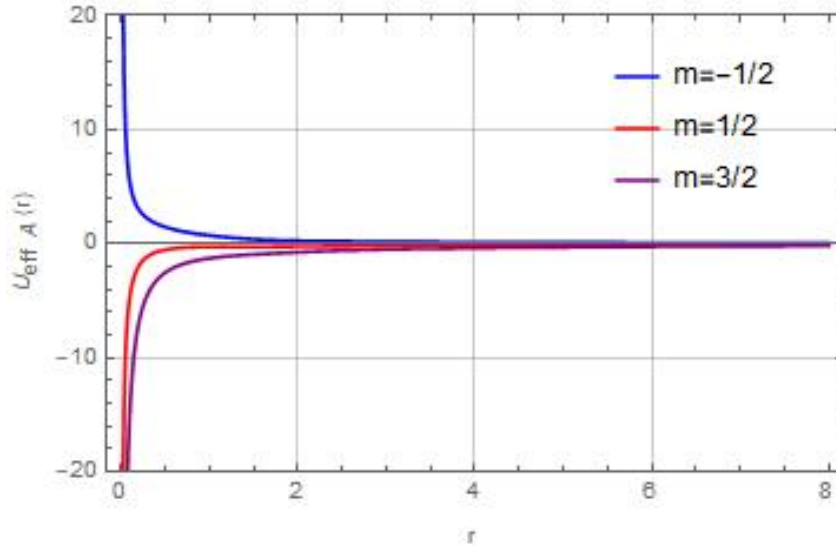
$$U_B(r) = \frac{m}{r} + A_\theta(r). \quad (5.64)$$

Estes potenciais surgem diretamente da forma funcional do Hamiltoniano quando ele atua sobre o espinor. A principal diferença, além da ordem da equação, é que $U_A(r)$ e $U_B(r)$ têm dimensão de energia (em unidades naturais) e aparecem linearmente nas equações diferenciais. Já $U_{A,B}^2$ têm dimensão de energia ao quadrado e emergem apenas no processo de desacoplamento.

Ao examinarmos o comportamento dos potenciais efetivos lineares $U_A(r)$ e $U_B(r)$, observamos que, nas proximidades da origem, o termo centrífugo $\pm m/r$ tende a dominar a es-

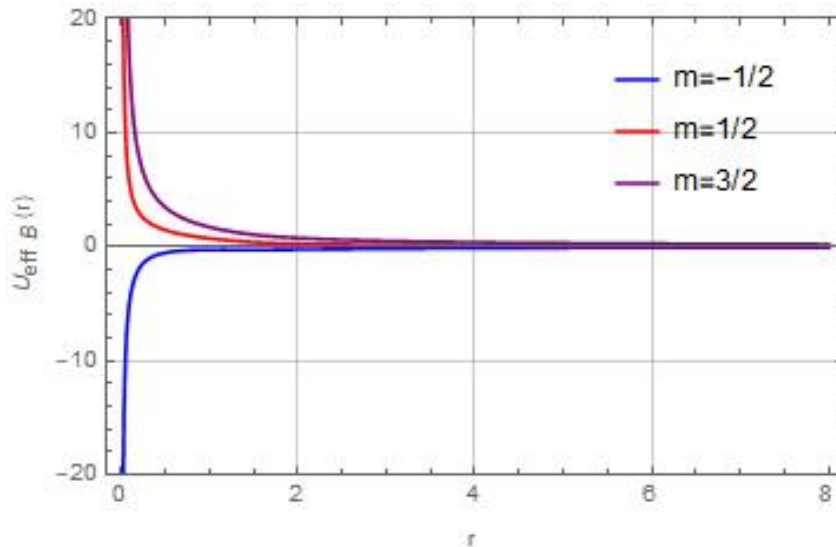
trutura desses potenciais. Isso ocorre porque, para uma superfície gaussiana, o pseudo-potencial de gauge $A_\theta(r)$ é regular em $r = 0$ e tende suavemente a zero, enquanto o termo centrífugo diverge como $1/r$. Mesmo em geometrias mais extremas, como a superfície do tipo vulcão, onde $A_\theta(r)$ apresenta uma divergência na origem (como mostrado no Gráfico 4), a contribuição centrífuga continua sendo, em geral, o principal fator determinante na forma dos potenciais efetivos lineares, devido à sua divergência universal mais pronunciada.

Gráfico 9 – U_A para diferentes valores de m .



Elaborado pelo Autor.

Gráfico 10 – U_B para diferentes valores de m .



Elaborado pelo Autor.

Fisicamente, os potenciais $U_A(r)$ e $U_B(r)$ expressam a interação entre o momento angular orbital do férmion e a curvatura local da superfície. Como se pode ver nos Gráficos 9 e 10, o sinal de m desempenha um papel crucial: para certos valores de m , os potenciais resultam em barreiras, enquanto para outros configuram poços de potencial próximos à origem. Essa estrutura do potencial efetivo modula diretamente a amplitude de probabilidade de presença

do elétron em cada sub-rede (A ou B), influenciando a distribuição espacial das soluções do espinor.

Em resumo, enquanto os potenciais quadráticos $U_{A,B}^2(r)$ refletem a estrutura geral da equação desacoplada e impõem restrições fortes na região central, os potenciais lineares $U_{A,B}(r)$ fornecem uma descrição mais direta da força efetiva sentida pelas componentes do espinor ao longo da superfície. Em ambos os casos, a curvatura age como um campo externo que interage com o momento angular, dando origem a fenômenos como confinamento, reflexão parcial ou completa, e até possíveis estados ligados, dependendo dos parâmetros do sistema.

5.9 Amplitudes de Probabilidade

Com a equação diferencial que descreve a dinâmica do elétron sobre a superfície em mãos, podemos agora obter as soluções e analisar o comportamento das densidades de probabilidade. Particularmente, nos interessa entender o que ocorre com o elétron nas proximidades da origem. A equação que rege as funções radiais $\chi_A(r)$ e $\chi_B(r)$, resultantes do desacoplamento das componentes do espinor, é dada por:

$$-\chi_{A,B}''(r) + \frac{m}{r^2}(m \pm 1)\chi_{A,B}(r) = \kappa^2 \chi_{A,B}(r), \quad (5.65)$$

onde o sinal \pm depende da componente considerada (+ para χ_A , - para χ_B). Devido à presença do termo centrífugo dependente de m , observa-se uma assimetria entre as soluções para ψ_A e ψ_B induzida pela curvatura. No entanto, essa assimetria é compensada por uma simetria mais profunda: se χ_A é solução da equação com momento angular m , então χ_B pode ser obtida a partir da substituição $m \rightarrow -m$. Portanto, basta resolver a equação para χ_A , e a solução para χ_B segue diretamente dessa correspondência.

A equação (5.65) é uma equação diferencial do tipo Bessel, cujas soluções gerais são combinações lineares das funções de Bessel¹ de primeira e segunda espécies. Assim, podemos escrever a solução geral para $\chi_A(r)$ como:

$$\chi_A(r) = \sqrt{r} \left[C_1 J_{1+2m}(\kappa r) + C_2 Y_{1+2m}(\kappa r) \right], \quad (5.66)$$

em que $J_\nu(\kappa r)$ e $Y_\nu(\kappa r)$ representam, respectivamente, as funções de Bessel de primeira e segunda espécies, definidas por:

$$J_\nu(\kappa r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(n + \nu + 1)} \left(\frac{\kappa r}{2} \right)^{2n+\nu}, \quad (5.67)$$

e

$$Y_\nu(\kappa r) = \frac{J_\nu(\kappa r) \cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(\kappa r)}{\sin(\nu\pi)}. \quad (5.68)$$

Como $Y_\nu(\kappa r)$ apresenta divergência na origem ($r \rightarrow 0$), e estamos interessados em soluções fisicamente admissíveis e normalizáveis, impomos que $C_2 = 0$, de modo a eliminar o comportamento singular. Assim, temos:

¹ Caso o leitor tenha interesse em saber mais sobre as equações do tipo Bessel e suas funções, ele pode buscar mais informações nas Ref. [76, 86].

$$\chi_A(r) = C_1 \sqrt{r} J_{\frac{1+2m}{2}}(\kappa r). \quad (5.69)$$

Para reconstruir a solução total da componente ψ_A , consideramos a redefinição $\psi_A(r) = \mu(r)\chi_A(r)$, onde $\mu(r)$ incorpora a contribuição geométrica do fator de curvatura. No caso da superfície gaussiana, a função $\mu(r)$ pode ser obtida analiticamente a partir da integração da fase geométrica (Eq.5.80), resultando em:

$$\mu(r) = e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}}. \quad (5.70)$$

Portanto, a componente $\psi_A(r)$ pode ser escrita como:

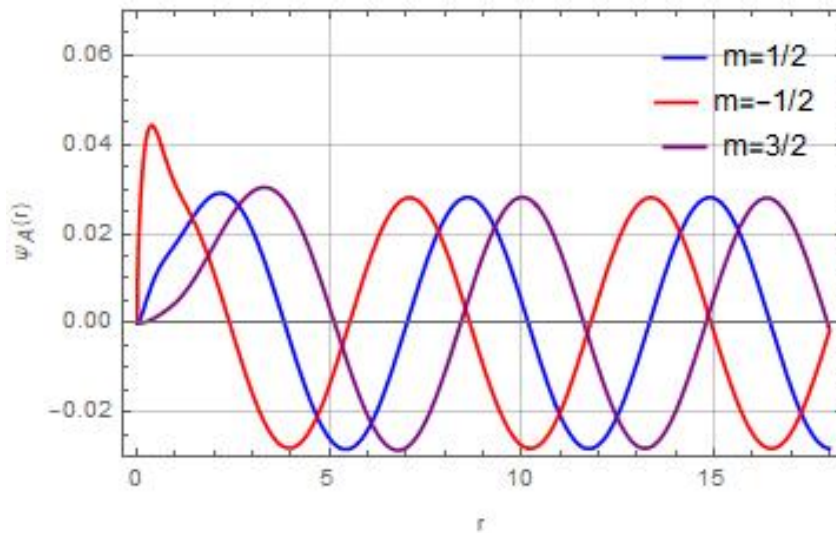
$$\psi_A(r) = C_1 e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}} \sqrt{r} J_{\frac{1+2m}{2}}(\kappa r). \quad (5.71)$$

Aplicando a simetria $m \rightarrow -m$, a componente $\psi_B(r)$ associada segue diretamente como:

$$\psi_B(r) = C_1 e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}} \sqrt{r} J_{\frac{1-2m}{2}}(\kappa r). \quad (5.72)$$

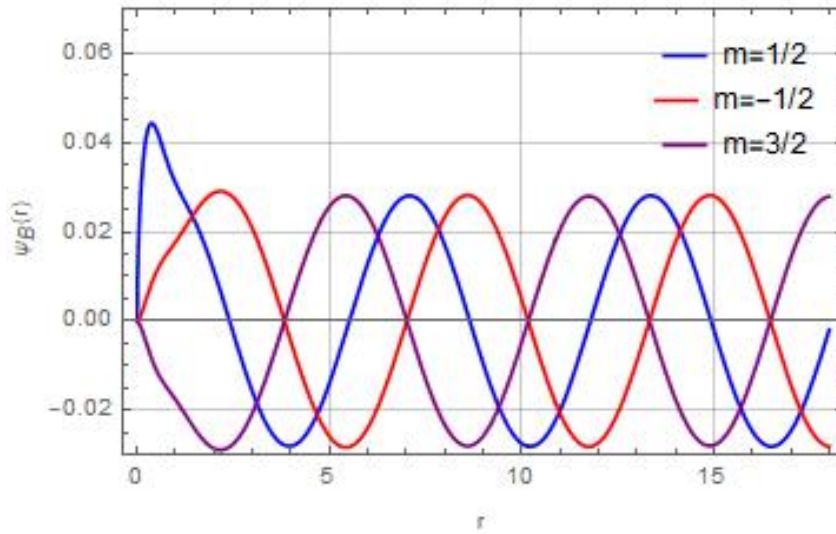
Essas expressões são válidas tanto para $m > 0$ quanto para $m < 0$, sendo que o importante é que a troca $m \leftrightarrow -m$ permite obter uma componente a partir da outra. Isso reflete a estrutura simétrica do sistema sob reversão do momento angular, ainda que a curvatura introduza uma diferenciação sutil no comportamento local das soluções.

Gráfico 11 – ψ_A para diferentes valores de m .



Elaborado pelo Autor.

Os gráficos 11 e 12 ilustram o comportamento das funções $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$, respectivamente, para diferentes valores do momento angular m , considerando a solução obtida para a superfície gaussiana. Observa-se que, para grandes valores de r , ambas as componentes apresentam oscilações características de ondas planas, com amplitudes moduladas suavemente pela função exponencial proveniente do fator $\mu(r)$. Além disso, a comparação entre os diferentes valores de m revela uma clara diferença de fase e amplitude nas soluções, indicando que o momento angular influencia diretamente a distribuição radial das componentes do espinor. Como esperado pela simetria discutida anteriormente, a inversão de sinal em m resulta na troca dos

Gráfico 12 – ψ_B para diferentes valores de m .

Elaborado pelo Autor.

perfis entre ψ_A e ψ_B , o que é visível na correspondência entre os gráficos.

Uma vez determinada a forma funcional das componentes do espinor, é necessário impor a condição de normalização para que possamos interpretá-lo fisicamente como uma função de onda. Consideremos, portanto, o espinor completo escrito em coordenadas polares:

$$\Psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} \psi_A(r, \theta) \\ \psi_B(r, \theta) \end{pmatrix} = C_1 e^{\frac{\alpha}{4}} e^{-\frac{2r^2}{b^2}} \sqrt{r} \begin{pmatrix} J_{\frac{1+2m}{2}}(\kappa r) e^{im\theta} \\ J_{\frac{1-2m}{2}}(\kappa r) e^{im\theta} \end{pmatrix}. \quad (5.73)$$

A densidade de probabilidade associada ao estado é definida por:

$$\rho(r, \theta) = \Psi^\dagger(r, \theta) \Psi(r, \theta) = |\psi_A(r, \theta)|^2 + |\psi_B(r, \theta)|^2. \quad (5.74)$$

Note que os termos angulares têm módulo unitário e, portanto, não contribuem para a densidade. Assim, obtemos:

$$\rho(r) = |C_1|^2 e^{\frac{\alpha}{2}} e^{-\frac{2r^2}{b^2}} r \left[J_{\frac{1+2m}{2}}(\kappa r)^2 + J_{\frac{1-2m}{2}}(\kappa r)^2 \right]. \quad (5.75)$$

Concluimos, portanto, que $\rho(r, \theta)$ é independente de θ , ou seja, o sistema apresenta de fato simetria axial e podemos tratá-la como uma função apenas de r .

A condição de normalização impõe que a probabilidade total de encontrar a partícula em todo o espaço seja igual a 1. Em coordenadas polares, isso corresponde à integral:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty dr r \rho(r) = 1. \quad (5.76)$$

Substituindo a expressão de $\rho(r)$ na integral, temos:

$$2\pi |C_1|^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{\frac{\alpha}{2}} e^{-\frac{2r^2}{b^2}} \left[J_{\frac{1+2m}{2}}(\kappa r)^2 + J_{\frac{1-2m}{2}}(\kappa r)^2 \right] = 1. \quad (5.77)$$

Dessa forma, a constante de normalização C_1 é dada por:

$$C_1 = \left[2\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{\frac{\alpha}{2}e^{-\frac{2r^2}{b^2}}} \left(J_{\frac{1+2m}{2}}(kr)^2 + J_{\frac{1-2m}{2}}(kr)^2 \right) \right]^{-1/2}. \quad (5.78)$$

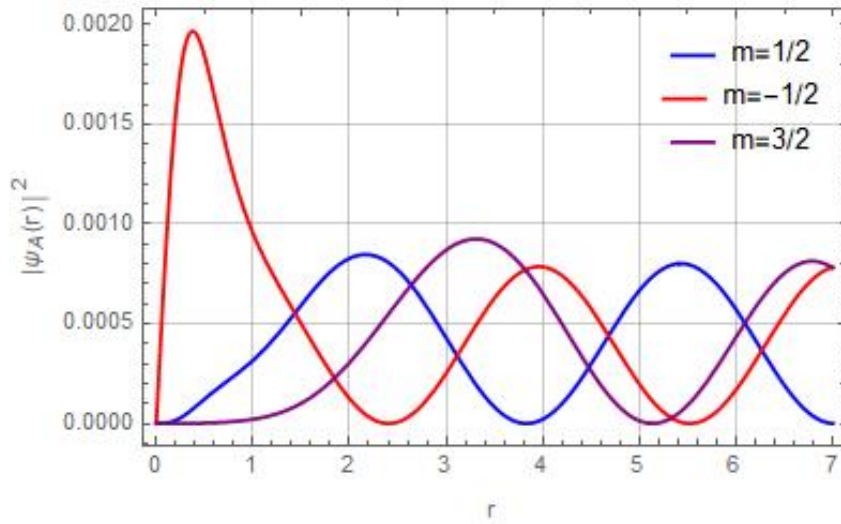
Consequentemente, a densidade de probabilidade normalizada assume a forma:

$$\rho(r) = |C_1|^2 e^{\frac{\alpha}{2}e^{-\frac{2r^2}{b^2}}} r \left[J_{\frac{1+2m}{2}}(kr)^2 + J_{\frac{1-2m}{2}}(kr)^2 \right]. \quad (5.79)$$

Note que a integral que define C_1 não possui solução analítica em termos de funções elementares ou especiais conhecidas. Assim, é necessário recorrer a métodos numéricos para seu cálculo, dado um valor específico de κ .

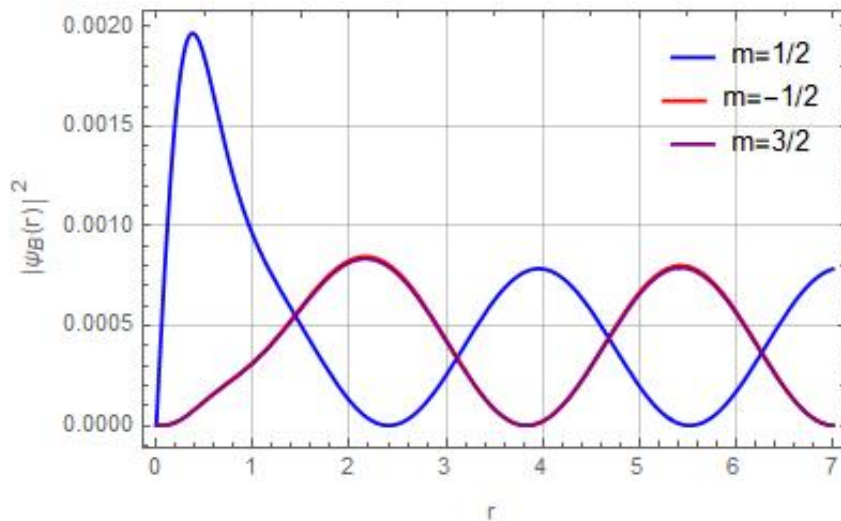
Temos que ψ_A^2 e ψ_B^2 fornecem a densidade de probabilidade de encontrar o elétron em cada uma dessas sub-redes em uma determinada configuração [6].

Gráfico 13 – $|\psi_A|^2$ para diferentes valores de m .



Elaborado pelo Autor.

Gráfico 14 – $|\psi_B|^2$ para diferentes valores de m .



Elaborado pelo Autor.

Nos gráficos 13 e 14, podemos observar a distribuição de probabilidade para as componentes ψ_A e ψ_B em função do parâmetro m . Quando $m = 1/2$, a componente ψ_B domina, exibindo uma densidade de probabilidade significativamente maior de encontrar o elétron na sub-rede B; em contraste, para $m = -1/2$, é a componente ψ_A que se destaca, indicando que a probabilidade de localizar o elétron na sub-rede A supera a da sub-rede B. Para $m = 3/2$, o comportamento de $|\psi_A|^2$ e $|\psi_B|^2$ exibe oscilações radiais distintas, mostrando que, em certas regiões do espaço (valores de r), a sub-rede A apresenta maior probabilidade, enquanto em outras a sub-rede B predomina. Esse padrão indica que a distribuição do elétron não está exclusivamente concentrada em uma única sub-rede ao longo do espaço, ao contrário, existem regiões específicas em que $|\psi_A|^2$ é mais intenso e outras em que $|\psi_B|^2$ se sobressai.

Além disso, observa-se que para grandes valores de r , $|\psi_{A,B}|^2$ apresenta oscilações características de soluções para $\psi_{A,B}$ de ondas planas como dito anteriormente. Isso indica que não há confinamento em regiões distantes da origem, o que está de acordo com o comportamento esperado para partículas livres em um meio com curvatura localizada e decaimento assintótico suave. A ausência de termos que atuem como potenciais atrativos e de confinamento impede a formação de estados ligados no sistema.

Por outro lado, para pequenos valores de r , observamos que os elétrons tendem a se concentrar nas proximidades da origem, embora nunca a atinjam de fato. Isso se deve à presença de um potencial efetivo centrífugo, cujo comportamento — atrativo ou repulsivo — depende diretamente do número quântico m . Especificamente, o potencial efetivo $U_A^2(r)$ é repulsivo para $m = 1/2$ e atrativo para $m = -1/2$, enquanto o oposto ocorre para $U_B^2(r)$: ele é atrativo para $m = 1/2$ e repulsivo para $m = -1/2$. Essa assimetria influencia diretamente a distribuição da densidade de probabilidade entre as sub-redes do grafeno.

Como consequência, embora os elétrons sejam sempre refletidos ao se aproximarem da origem, a interação com o potencial efetivo faz com que se acumulem preferencialmente em uma das sub-redes. Quando $m = 1/2$, a densidade de probabilidade é maior na sub-rede B, ao passo que para $m = -1/2$ ela se concentra na sub-rede A. Esse fenômeno evidencia como a curvatura localizada, por meio do acoplamento geométrico no Hamiltoniano, induz uma diferenciação espacial entre as componentes do espinor. Assim, o número quântico m desempenha um papel fundamental na determinação da sub-rede preferencial ocupada pelos elétrons em regiões próximas à origem.

5.10 Dinâmica do Elétron na Superfície Tipo Vulcão

Analogamente ao que foi feito anteriormente para a superfície gaussiana, analisaremos agora a dinâmica do elétron sobre uma superfície com geometria do tipo vulcão. Muitos dos resultados obtidos na seção anterior poderão ser aproveitados, já que a estrutura matemática da equação dinâmica permanece a mesma. Nosso objetivo principal nesta seção é entender como a curvatura localizada afeta a propagação do elétron quando este se move sobre essa nova superfície curva.

A equação diferencial para as funções radiais $\chi_{A,B}(r)$ (Eq. 5.65), obtida anteriormente a partir do desacoplamento das componentes do espinor, continua válida neste caso. No entanto, o fator $\mu(r)$, responsável por incorporar os efeitos geométricos via o pseudopotencial de gauge A_θ , depende da curvatura específica da superfície, e portanto será diferente.

Para a superfície tipo vulcão, o fator $\mu(r)$ é dado por:

$$\mu(r) = \exp \left[- \int_0^r \frac{1}{2r'} \left(1 - \left[1 + A^2 e^{-2r'^2/b^2} \left(1 - \frac{2r'^2}{b^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \right) dr' \right], \quad (5.80)$$

Observe que essa integral no expoente não possui uma solução analítica em termos de funções elementares. Para contornar essa dificuldade, adotamos uma aproximação por série de Taylor, válida no regime de pequenas perturbações, ou seja, quando o parâmetro $\alpha = A^2/b^4 \ll 1$. Este é exatamente o regime que estamos considerando, já que assumimos que $b > A$.

Aplicando essa aproximação (Eq. 5.81), o pseudopotencial de gauge $A_\theta(r)$ pode ser escrito como:

$$A_\theta(r) \approx \frac{A^2 \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)^2 e^{-2r^2/b^2}}{4r}. \quad (5.81)$$

Substituindo essa expressão aproximada de $A_\theta(r)$ na Eq. (5.80), e considerando que o fator exponencial e o termo polinomial são suaves o suficiente para permitir simplificação, obtemos:

$$\mu(r) \approx \exp \left(-\frac{1}{4} \ln |r| \right). \quad (5.82)$$

Assim, as soluções gerais para as componentes do espinor ψ_A e ψ_B são dadas por:

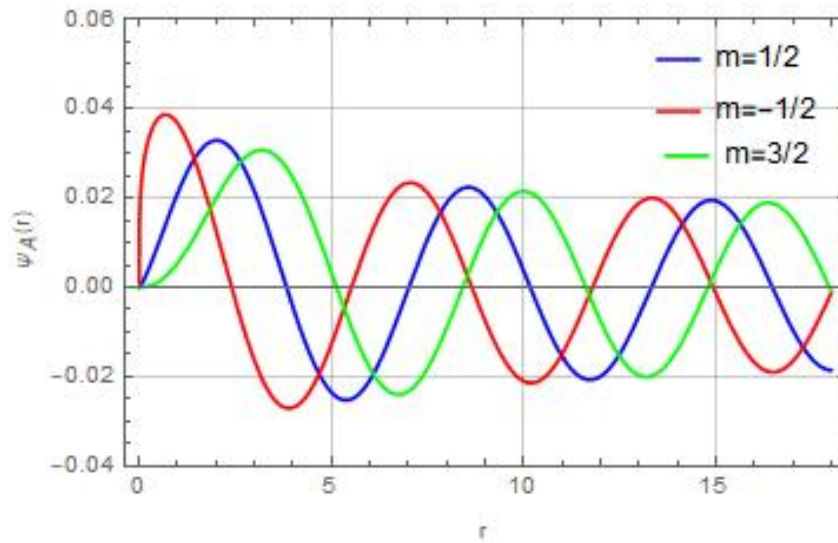
$$\psi_{A,B}(r) = C \cdot e^{-[\frac{1}{4} \ln r]} \cdot \sqrt{r} \cdot J_{\frac{1 \pm 2m}{2}}(\kappa r), \quad (5.83)$$

onde $J_\nu(\kappa r)$ representa a função de Bessel de primeira espécie.

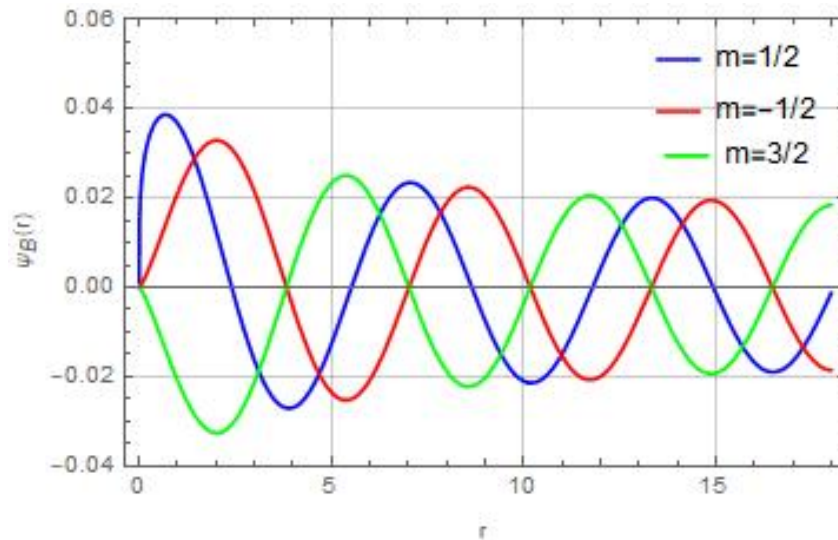
Essas soluções revelam uma modulação diferente daquelas obtidas na superfície gaussiana, já que o fator $\mu(r)$ introduz uma dependência em $e^{-[\frac{1}{4} \ln r]}$, alterando a estrutura de normalização e o comportamento assintótico próximo da origem.

Os gráficos 15 e 16 mostram o comportamento das componentes $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$ para diferentes valores do momento angular m , considerando a superfície tipo vulcão. Como previsto pelas soluções obtidas, observa-se que ambas as componentes apresentam um comportamento oscilatório modulado pela fase geométrica dada por $\mu(r)$ nesta geometria. Essa fase modifica a amplitude das oscilações em comparação com o caso da superfície gaussiana, levando a uma redistribuição das regiões de maior probabilidade. Além disso, observa-se que para valores grandes de r , as soluções recuperam um padrão oscilatório característico de ondas planas, comportamento esse similar ao que foi discutido anteriormente para o caso da superfície gaussiana, indicando novamente a ausência de confinamento em regiões distantes da origem.

A partir dos gráficos 17 e 18, é possível observar como a densidade de probabilidade se distribui entre as sub-redes A e B em função do número quântico m . Quando $m = 1/2$, nota-se que a componente ψ_B apresenta uma densidade de probabilidade significativamente maior do que ψ_A nas regiões próximas à origem, indicando que a sub-rede B é a energeticamente mais favorecida nesse caso. Por outro lado, para $m = -1/2$, o cenário se inverte: a densidade de ψ_A é mais pronunciada, o que aponta para uma preferência pela sub-rede A. Já para $m = 3/2$,

Gráfico 15 – Comportamento de ψ_A^2 para diferentes valores de m .

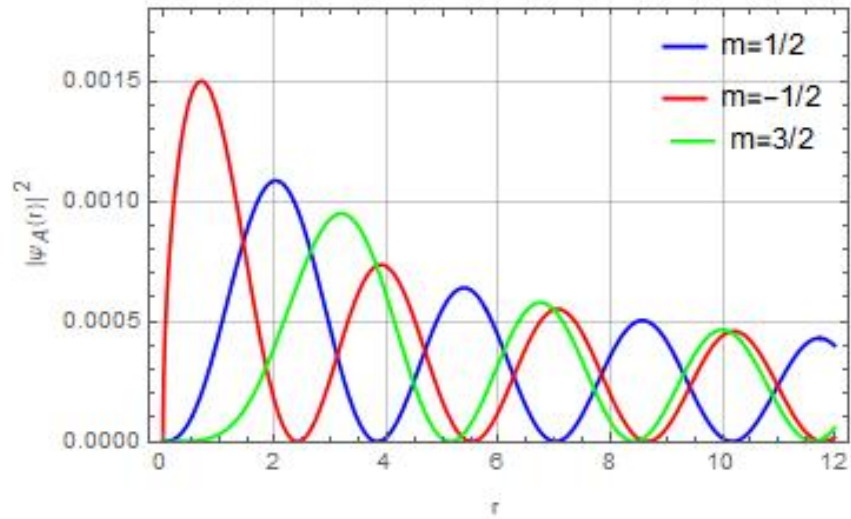
Elaborado pelo Autor.

Gráfico 16 – Comportamento de ψ_B^2 para diferentes valores de m .

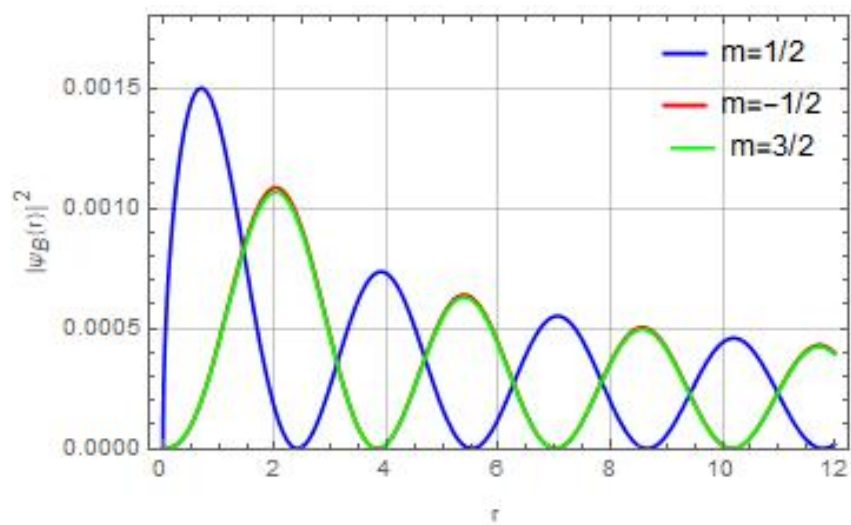
Elaborado pelo Autor.

assim como no caso da gaussiana, observa-se que ambas as componentes ψ_A e ψ_B apresentam densidades mais distribuídas e com amplitudes mais equilibradas, revelando que, nesse caso, não há uma sub-rede claramente favorecida em relação à outra.

Ao analisar as densidades de probabilidade para as duas sub-redes $|\psi_A|^2$ e $|\psi_B|^2$ na superfície tipo vulcão, em comparação com a superfície gaussiana, como mostrado nos gráficos 17 e 18, torna-se evidente que o papel do parâmetro m é crucial na determinação de qual sub-rede é energeticamente mais favorecida. Ambas as soluções exibem comportamentos semelhantes para diferentes valores de m . A principal diferença entre as superfícies tipo vulcão e gaussiana reside na fase geométrica $\mu(r)$ associada ao pseudopotencial A_θ , a qual modifica as funções ψ_A e ψ_B .

Gráfico 17 – Densidade de probabilidade para ψ_A com diferentes valores de m .

Elaborado pelo Autor.

Gráfico 18 – Densidade de probabilidade para ψ_B com diferentes valores de m .

Elaborado pelo Autor.

6 CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Neste capítulo, passamos a incorporar a influência de um campo magnético externo constante na dinâmica dos elétrons, ampliando nossa análise, que até então considerava apenas os efeitos da curvatura localizada sobre os estados fermiônicos. Na ausência de campos externos, observamos que os estados não são quantizados, os elétrons podem assumir qualquer valor de energia dentro do espectro contínuo, sem a formação de estados ligados. Com a introdução de um campo magnético real, torna-se possível investigar como o espectro de energia é modificado por essa nova interação, podendo dar origem aos característicos níveis de Landau [87, 88], bem conhecidos no contexto do grafeno plano.

Nos capítulos anteriores, analisamos o impacto da curvatura intrínseca por meio do surgimento de um pseudo-potencial de gauge $A_\theta(r)$, que emergia da geometria da superfície e influenciava diretamente o movimento dos férmions de Dirac. Este termo, embora não representasse um campo magnético físico, exercia um papel análogo na modificação da fase e trajetória dos elétrons. Agora, voltamos nosso foco para o caso em que um campo magnético real B é aplicado perpendicularmente à folha de grafeno, preservando a mesma geometria de superfície estudada anteriormente. O objetivo principal é realizar uma comparação detalhada entre os cenários com e sem campo magnético real, investigando como a presença de B altera o espectro de energia, a estrutura dos estados ligados e o comportamento assintótico das soluções. Em particular, buscamos entender como o campo magnético real interage com os efeitos geométricos já presentes, se ele reforça ou suaviza as barreiras impostas pelo pseudo-potencial $A_\theta(r)$, e como a quantização do movimento radial pode ser afetada pela curvatura.

6.1 Hamiltoniano efetivo para um sistema com um campo B externo

Para incluir a presença de um campo magnético externo constante na direção z (componente $B_z = B$) na equação de Dirac sem massa em uma superfície curva, é necessário modificar a derivada covariante para incorporar o acoplamento eletromagnético [44]. Essa modificação é expressa como:

$$D_\mu = \partial_\mu + \Omega_\mu + i\frac{e}{\hbar}A_\mu, \quad (6.1)$$

onde $e > 0$ representa a carga do elétron, e A_μ é o potencial vetor associado ao campo magnético externo. Assim, a equação de Dirac passa a ter a forma:

$$i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu + \Omega_\mu + i\frac{e}{\hbar}A_\mu \right) \psi = 0. \quad (6.2)$$

Adotando coordenadas cartesianas no espaço tridimensional plano, podemos escolher o potencial vetor na forma simétrica:

$$\vec{A} = \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0 \right), \quad (6.3)$$

o que garante que o campo magnético seja constante na direção z , ou seja, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = B\hat{z}$,

satisfazendo também a condição de ausência de monopolos magnéticos ($\nabla \cdot \vec{B} = 0$).

Para adaptar o potencial vetor ao sistema com simetria radial, realizamos a mudança para coordenadas polares, utilizando as relações:

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta. \quad (6.4)$$

A decomposição do vetor \vec{A} nas componentes radiais e angulares é dada por:

$$a_r = a_x \cos \theta + a_y \sin \theta, \quad (6.5)$$

$$a_\theta = -a_x \sin \theta + a_y \cos \theta. \quad (6.6)$$

Substituindo a expressão para \vec{A} , obtemos:

$$a_r = 0, \quad a_\theta = \frac{Br}{2}. \quad (6.7)$$

Dessa forma, a equação de Dirac sem massa para férmions em uma superfície curva na presença de um campo magnético externo assume a forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar v_F \gamma^0 \left[\gamma^r \partial_r + \gamma^\theta \left(\partial_\theta + \Gamma_\theta + i \frac{e r a_\theta}{\hbar} \right) \right] \psi. \quad (6.8)$$

No caso plano (isto é, na ausência de curvatura), os vierbeins assumem a forma trivial (Ver apêndice B), e os operadores de Dirac se simplificam. As matrizes direcionais tornam-se:

$$\gamma^r = \gamma^1, \quad \gamma^\theta = \frac{1}{r} \gamma^2, \quad (6.9)$$

e a conexão de spin se reduz à forma:

$$\Omega_\theta = \frac{i}{2} \sigma_3. \quad (6.10)$$

Substituindo essas expressões na equação de Dirac com o potencial vetor do campo magnético externo, obtemos o Hamiltoniano efetivo para o plano com simetria polar:

$$\hat{H}_{\text{Flat}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & \partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta + \frac{1}{2r} - \frac{eBr}{2\hbar} \\ \partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta + \frac{1}{2r} + \frac{eBr}{2\hbar} & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.11)$$

A dedução detalhada deste Hamiltoniano segue exatamente os mesmos passos técnicos apresentados no Capítulo 3 e no Apêndice B, com a única diferença sendo a presença do termo adicional associado ao campo magnético externo real B . Assim como antes, as componentes da conexão de spin, os termos angulares e o fator $\frac{1}{2r}$ emergem naturalmente ao se reescrever a equação de Dirac em coordenadas polares.

Quando consideramos agora a presença da curvatura da superfície, o Hamiltoniano adquire termos adicionais devido à geometria. Em particular, o termo A_θ , que antes representava um pseudo-potencial induzido pela curvatura, é agora somado ao efeito do campo real B . O Hamiltoniano geral para o sistema curvo na presença de campo magnético real torna-se:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar v_F \gamma^0 \left[\gamma^r \partial_r + \gamma^\theta \left(\partial_\theta + \Gamma_\theta + i \frac{e r}{\hbar} a_\theta \right) \right] \psi, \quad (6.12)$$

onde as matrizes direcionais γ^r e γ^θ são dadas por:

$$\gamma^r = F(r) (\gamma^1 \cos \theta + \gamma^2 \sin \theta), \quad (6.13)$$

$$\gamma^\theta = \frac{1}{r} (-\gamma^1 \sin \theta + \gamma^2 \cos \theta), \quad (6.14)$$

e $A_\theta(r) = a_\theta + A_\theta^{(\text{geom})}$, sendo a soma do potencial vetorial do campo externo ($a_\theta = Br/2$) e do pseudo-potencial geométrico induzido pela curvatura.

Seguindo os mesmos procedimentos adotados anteriormente no Capítulo 3, obtemos a forma matricial do Hamiltoniano para o sistema curvo:

$$\hat{H}_{\text{curved}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & F(r)\partial_r + \frac{i}{r}\partial_\theta + A_\theta - \frac{eBr}{\hbar} \\ F(r)\partial_r - \frac{i}{r}\partial_\theta + A_\theta + \frac{eBr}{\hbar} & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.15)$$

ou, de forma compacta, ao definirmos os operadores diferenciais $\hat{\Delta}$ e $\hat{\Delta}^\dagger$ como no capítulo anterior, temos:

$$\hat{H}_{\text{curved}} = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & \hat{\Delta} - \frac{eBr}{\hbar} \\ \hat{\Delta}^\dagger + \frac{eBr}{\hbar} & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.16)$$

Podemos observar que a estrutura do Hamiltoniano permanece formalmente semelhante àquela obtida no Capítulo 3, onde apenas os efeitos da curvatura eram considerados. A principal modificação é a adição dos termos proporcionais a $\frac{eBr}{\hbar}$, que refletem a presença do campo magnético externo real. Esses termos atuam como potenciais efetivos adicionais que influenciam diretamente a dinâmica dos férmions e modificam o espectro de energia, interferindo potencialmente nos estados ligados, nos níveis quantizados e na densidade de estados do sistema.

6.2 Equações diferenciais para ψ_A e ψ_B na presença de campo magnético

Uma vez estabelecida a forma do Hamiltoniano efetivo para férmions de Dirac em uma superfície curva sob a ação de um campo magnético externo constante, buscamos agora as soluções da equação de autovalores associada:

$$\hat{H}_{\text{curved}} \psi = E \psi. \quad (6.17)$$

Como discutido anteriormente, o Hamiltoniano apresenta uma estrutura matricial com operadores diferenciais não triviais que acoplam as componentes do espinor. Escrevendo explicitamente o sistema, obtemos:

$$\begin{cases} -i\hbar v_F \left(\hat{\Delta} - \frac{eBr}{\hbar} \right) \psi_2 = E \psi_1, \\ -i\hbar v_F \left(\hat{\Delta}^\dagger + \frac{eBr}{\hbar} \right) \psi_1 = E \psi_2. \end{cases} \quad (6.18)$$

Mais uma vez nos deparamos com um sistema de equações acopladas entre as componentes do espinor, ψ_A e ψ_B , como já observado no caso sem campo magnético externo. O procedimento de desacoplamento segue os mesmos passos discutidos no Capítulo 3, razão pela qual o apresentamos aqui de forma mais sucinta.

Aplicando o operador conjugado de uma das equações sobre a outra, obtemos:

$$\left[\hat{\Delta} - \frac{eBr}{\hbar} \right] \left[\left(\hat{\Delta}^\dagger + \frac{eBr}{\hbar} \right) \psi_1 \right] = -\kappa^2 \psi_1, \quad (6.19)$$

$$\left[\hat{\Delta}^\dagger + \frac{eBr}{\hbar} \right] \left[\left(\hat{\Delta} - \frac{eBr}{\hbar} \right) \psi_2 \right] = -\kappa^2 \psi_2, \quad (6.20)$$

onde definimos $\kappa^2 = \left(\frac{E}{\hbar v_F} \right)^2$. As expressões acima nos fornecem equações diferenciais de segunda ordem para as componentes do espinor.

Expandindo os operadores diferenciais, obtemos explicitamente as equações diferenciais para ψ_1 e ψ_2 , as quais envolvem contribuições tanto do pseudo-campo de gauge $A_\theta(r)$ oriundo da curvatura, quanto do campo magnético externo real B . Desse modo, temos

$$\hat{\Delta} \left(\hat{\Delta}^\dagger \psi_1 \right) + \frac{eB}{\hbar} F(r) \psi_1 + 2i \frac{eB}{\hbar} \partial_\theta \psi_1 - \frac{e^2 B^2 r^2}{\hbar^2} \psi_1 = -\kappa^2 \psi_1, \quad (6.21)$$

$$\hat{\Delta}^\dagger \left(\hat{\Delta} \psi_2 \right) - \frac{eB}{\hbar} F(r) \psi_2 + 2i \frac{eB}{\hbar} \partial_\theta \psi_2 - \frac{e^2 B^2 r^2}{\hbar^2} \psi_2 = -\kappa^2 \psi_2. \quad (6.22)$$

Adotando a separação de variáveis com simetria axial, escrevemos as componentes do espinor como:

$$\psi_1 = \psi_A(r) e^{im\theta}, \quad \psi_2 = \psi_B(r) e^{im\theta}. \quad (6.23)$$

Substituindo na equação, obtemos as equações diferenciais radiais para as componentes $\psi_A(r)$ e $\psi_B(r)$:

$$\begin{aligned} F^2(r) \psi_A''(r) + F(r) [F'(r) + 2A_\theta(r)] \psi_A'(r) \\ + \left[F(r) A_\theta'(r) + A_\theta^2(r) - \frac{m}{r^2} (m + F(r)) + \frac{eB}{\hbar} F(r) - \frac{2meB}{\hbar} - \frac{e^2 B^2 r^2}{\hbar^2} \right] \psi_A(r) \\ = -\kappa^2 \psi_A(r), \end{aligned} \quad (6.24)$$

$$\begin{aligned}
& F^2(r)\psi_B''(r) + F(r) [F'(r) + 2A_\theta(r)] \psi_B'(r) \\
& + \left[F(r)A_\theta'(r) + A_\theta^2(r) - \frac{m}{r^2}(m - F(r)) - \frac{eB}{\hbar}F(r) - \frac{2meB}{\hbar} - \frac{e^2B^2r^2}{\hbar^2} \right] \psi_B(r) \\
& = -\kappa^2\psi_B(r).
\end{aligned} \tag{6.25}$$

Essas equações constituem o ponto de partida para a análise espectral do sistema, permitindo o estudo de estados ligados, quantização de energia e possíveis efeitos do campo magnético na densidade de estados. A presença do termo $\frac{eB}{\hbar}$, permite uma comparação entre o campo externo real e o campo efetivo que surge geometria curva da superfície.

6.3 Soluções e os potenciais de confinamento

Para obter uma compreensão melhor do comportamento das soluções, consideramos uma aproximação com o intuito de simplificar o problema: desconsideramos os efeitos da variação espacial da velocidade de Fermi efetiva. Isso equivale a tomar $F(r) \approx 1$, ou seja, consideramos que as deformações geométricas não modificam significativamente a velocidade local dos férmions. Além disso, como foi feito no Capítulo 5, reescrevemos as componentes do espinor como um produto de uma função exponencial de fase geométrica e uma função escalar radial. Especificamente, fazemos a substituição $\psi_{A,B}(r) = \mu(r) \cdot \chi_{A,B}(r)$. Com essa transformação, as equações diferenciais para ψ_A e ψ_B assumem a forma já conhecida:

$$-\chi_A''(r) + U_A^2(r)\chi_A(r) = \kappa^2\chi_A(r), \tag{6.26}$$

$$-\chi_B''(r) + U_B^2(r)\chi_B(r) = \kappa^2\chi_B(r), \tag{6.27}$$

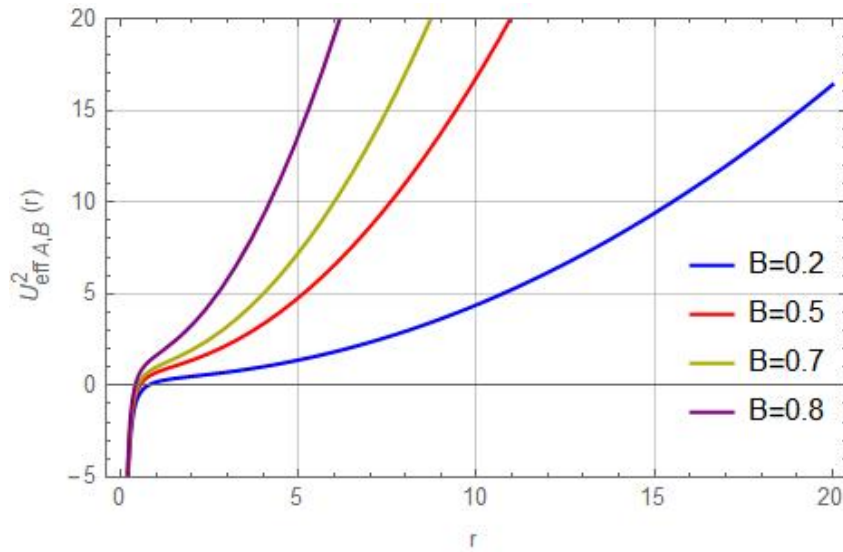
onde $\kappa^2 = \left(\frac{E}{\hbar v_F}\right)^2$.

Os potenciais efetivos quadráticos, por sua vez, refletem a combinação dos efeitos da curvatura, do momento angular m , e do campo magnético externo B . Os potenciais obtidos são:

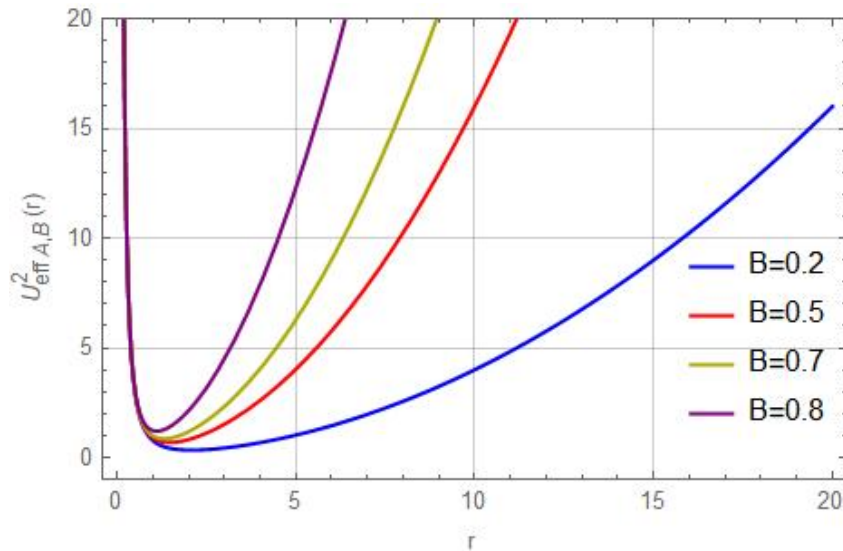
$$U_A^2(r) = \frac{m(m+1)}{r^2} - \frac{eB}{\hbar} + \frac{2meB}{\hbar} + \frac{e^2B^2r^2}{\hbar^2}, \tag{6.28}$$

$$U_B^2(r) = \frac{m(m-1)}{r^2} + \frac{eB}{\hbar} + \frac{2meB}{\hbar} + \frac{e^2B^2r^2}{\hbar^2}. \tag{6.29}$$

A partir das equações para os potenciais efetivos quadráticos $U_A^2(r)$ e $U_B^2(r)$, é possível observar que a presença de um campo magnético externo B introduz um termo de confinamento proporcional $\sim r^2$, além de modificar a estrutura dos termos centrífugos próximos à origem. Os Gráficos 19 e 20 ilustram de forma clara o impacto da variação do campo B sobre a forma dos potenciais. À medida que a intensidade do campo magnético aumenta, os potenciais tornam-se mais pronunciadamente parabólicos, elevando suas curvaturas e, conseqüentemente, o grau de confinamento imposto sobre os férmions.

Gráfico 19 – Potencial efetivo quadrático quando $m = -1/2$ (para ψ_A) e $m = 1/2$ (para ψ_B).

Elaborado pelo Autor.

Gráfico 20 – Potencial efetivo quadrático quando $m = 1/2$ (para ψ_A) e $m = -1/2$ (para ψ_B).

Elaborado pelo Autor.

Em ambos os gráfico, o termo quadrático dominante para $r \rightarrow \infty$, proporcionado por $e^2 B^2 r^2 / \hbar^2$, garante que os potenciais crescem indefinidamente, caracterizando um confinamento efetivo. Isso significa que as soluções associadas às equações diferenciais para $\chi_A(r)$ e $\chi_B(r)$ tendem a ser normalizáveis, indicando a formação de estados ligados. Portanto, esses gráficos confirmam visualmente que, na presença de um campo magnético externo, os potenciais efetivos atuam como potenciais de confinamento que restringem a propagação dos férmions a regiões limitadas do espaço, estabelecendo uma estrutura espectral quantizada.

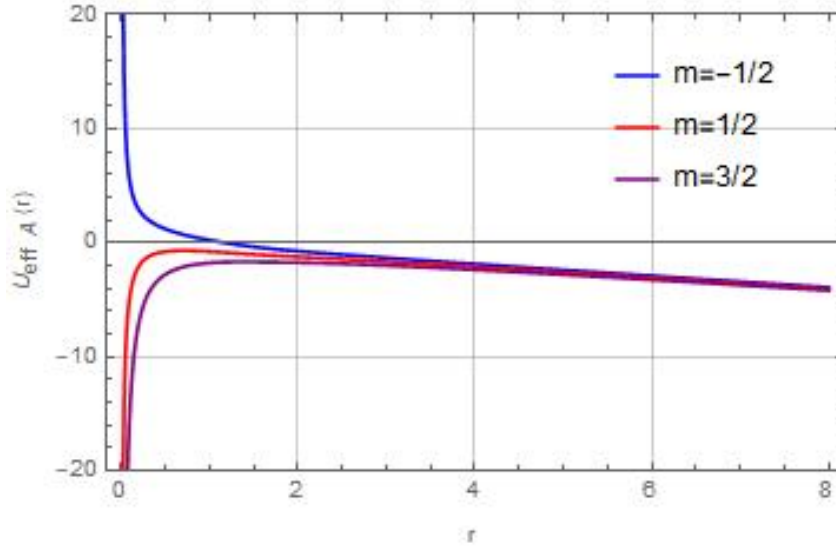
Na presença de um campo magnético externo ($B \neq 0$), o comportamento do potencial efetivo

$$U_A(r) = -\frac{m}{r} + A_\theta(r) - \frac{eBr}{\hbar}, \quad (6.30)$$

$$U_B(r) = +\frac{m}{r} + A_\theta(r) + \frac{eBr}{\hbar}, \quad (6.31)$$

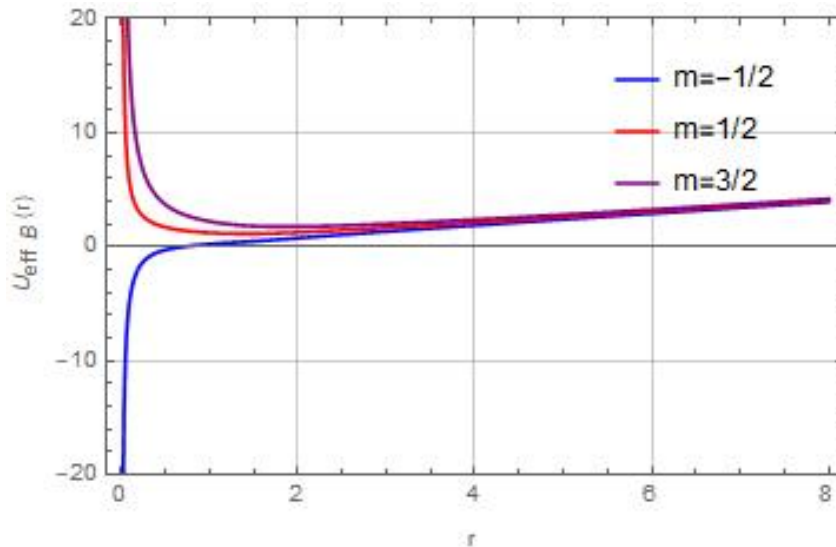
é qualitativamente modificado pela introdução de um termo linear em r , decorrente do acoplamento mínimo com o potencial vetor associado ao campo magnético.

Gráfico 21 – Potencial efetivo para ψ_A na presença de um campo B.



Elaborado pelo Autor.

Gráfico 22 – Potencial efetivo para ψ_B na presença de um campo B.



Elaborado pelo Autor.

Como mostrado nos gráficos 21 e 22, independentemente da forma funcional do pseudo-potencial de gauge $A_\theta(r)$ ou da geometria da superfície, seja ela do tipo gaussiana ou semelhante a um vulcão, o potencial efetivo exibe um crescimento linear assintótico para $r \rightarrow \infty$, além do termo centrífugo m/r , que domina nas proximidades da origem.

Assim, o campo magnético impõe um confinamento efetivo em grandes distâncias, enquanto o termo centrífugo continua sendo responsável por uma barreira repulsiva ou atrativa

em $r \approx 0$, dependendo do sinal de m . Esse comportamento, portanto, é universal e independe da geometria específica considerada, sendo determinado unicamente pela presença do campo magnético externo.

As equações para χ_A e χ_B demonstram que as soluções gerais dos respectivos problemas diferenciais podem ser expressas como combinações lineares de funções hipergeométricas confluentes e polinômios de Laguerre generalizados. No entanto, como indicado nos gráficos 19 e 20, há evidências claras de confinamento do elétron, o que certamente resulta em estados ligados. Para que tais soluções representem estados físicos normalizáveis, é necessário eliminar soluções com comportamento divergente para $r \rightarrow +\infty$, como ocorre frequentemente com as funções hipergeométricas confluentes.

Dessa forma, restringimos nossa análise às soluções do tipo Laguerre. As soluções resultantes são, então, dadas por:

$$\chi_A = \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1-2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1-2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{\frac{\kappa^2 \hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1-2m)-1} \left(\frac{Ber^2}{\hbar} \right)}{\sqrt{r}}, \quad (6.32)$$

$$\chi_B = \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1+2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1+2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{-\frac{\kappa^2 \hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1+2m)-1} \left(-\frac{Ber^2}{\hbar} \right)}{\sqrt{r}}. \quad (6.33)$$

De fato, para que as funções $\psi_{A,B} = \mu \cdot \chi_{A,B}$ sejam normalizáveis, é necessário que as soluções expressas em termos de polinômios de Laguerre se tornem funções polinomiais de ordem finita. Essa condição ocorre quando o parâmetro associado à série assume um valor inteiro não-negativo, o que impõe uma condição de quantização:

$$\frac{\kappa^2 \hbar}{4eB} = n \quad \Rightarrow \quad \kappa^2 = \frac{4eB}{\hbar} n \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.34)$$

Essa condição leva a valores discretos para κ . Assim, obtemos:

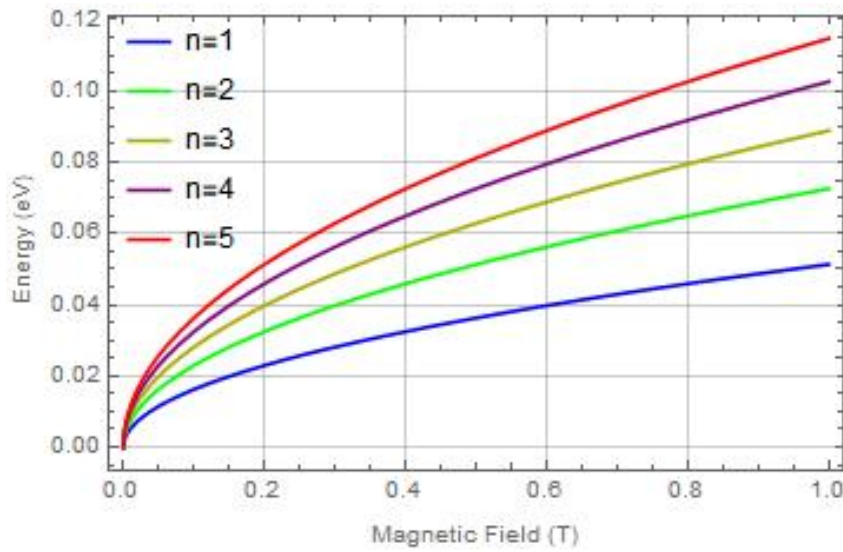
$$E_n = \hbar v_F \kappa = v_F \sqrt{4e\hbar B n}, \quad (6.35)$$

o que evidencia a estrutura discreta do espectro de energia associada à formação dos níveis de Landau. Essa quantização caracteriza o comportamento dos elétrons submetidos a um campo magnético, em que o número quântico n (um inteiro não-negativo) identifica cada um dos estados ligados. Outro ponto a ser destacado é que a função $\mu(r)$ permanece inalterada com a introdução do campo magnético. Portanto, essa função é a mesma tanto na ausência quanto na presença do campo externo, independentemente da geometria considerada.

No gráfico 23, observa-se de forma clara a quantização dos níveis de energia em função da intensidade do campo magnético externo, evidenciando a formação dos chamados níveis de Landau. Esse comportamento está de acordo com a expressão obtida anteriormente para os autovalores de energia $E_n = v_F \sqrt{4e\hbar B n}$, que mostra que a energia cresce com a raiz quadrada do campo magnético B para cada valor fixo de n . Cada curva no gráfico representa um valor fixo do número quântico n , variando de 1 a 5.

Conforme o campo magnético aumenta, os níveis de Landau se deslocam para ener-

Gráfico 23 – Níveis de Landau.



Elaborado pelo Autor.

gias mais altas, mantendo-se sempre discretos e separados entre si. Essa separação evidencia que apenas determinados valores de energia são permitidos para os férmions na presença de um campo B , o que é uma consequência direta do confinamento imposto pelo campo magnético.

6.4 Superfície Gaussiana e Superfície do Tipo Vulcão sob um Campo Magnético Externo

A introdução de um campo magnético externo constante B modifica significativamente a estrutura espectral do sistema. O primeiro aspecto a ser destacado é que, ao contrário do que ocorre na ausência de campo magnético, não existem mais estados não ligados: os níveis de energia tornam-se sempre discretos e quantizados, independentemente da geometria da superfície considerada, seja ela do tipo gaussiana ou semelhante a um vulcão. Esse comportamento está relacionado com a presença de termos quadráticos crescentes nos potenciais efetivos induzidos pelo campo B , os quais promovem confinamento dos férmions e, consequentemente, a formação de uma estrutura espectral composta por estados ligados.

Outro ponto relevante diz respeito à assimetria entre as sub-redes A e B , que persiste mesmo na presença do campo magnético. Tal assimetria se manifesta na distribuição espacial das densidades de probabilidade $|\psi_A|^2$ e $|\psi_B|^2$, cuja predominância continua a depender fortemente do valor do momento angular quântico m . Dessa forma, a curvatura da superfície, ao se acoplar ao momento angular, continua a influenciar a dinâmica do elétron, mesmo quando a quantização do espectro já está garantida pela ação do campo externo.

Para o caso específico da superfície gaussiana, as soluções radiais podem ser escritas como:

$$\psi_A(r) = e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}} \cdot \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1-2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1-2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{\frac{\kappa^2 \hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1-2m)-1} \left(\frac{Ber^2}{\hbar} \right)}{\sqrt{r}}, \quad (6.36)$$

$$\psi_B(r) = e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}} \cdot \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1+2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1+2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{-\frac{\kappa^2\hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1+2m)-1} \left(-\frac{Ber^2}{\hbar}\right)}{\sqrt{r}}. \quad (6.37)$$

Para o caso específico da superfície tipo vulcão, as soluções radiais podem ser escritas como:

$$\psi_A(r) = e^{-[\frac{1}{4}\ln r]} \cdot \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1-2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1-2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{\frac{\kappa^2\hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1-2m)-1} \left(\frac{Ber^2}{\hbar}\right)}{\sqrt{r}}, \quad (6.38)$$

$$\psi_B(r) = e^{-[\frac{1}{4}\ln r]} \cdot \frac{C \cdot 2^{\frac{1}{4}(1+2m)} (r^2)^{\frac{1}{4}(1+2m)} e^{-\frac{Ber^2}{2\hbar}} L_{-\frac{\kappa^2\hbar}{4Be}}^{\frac{1}{2}(1+2m)-1} \left(-\frac{Ber^2}{\hbar}\right)}{\sqrt{r}}. \quad (6.39)$$

As expressões acima incorporam tanto os efeitos do campo magnético externo (via os polinômios de Laguerre e o fator gaussiano $e^{-Ber^2/2\hbar}$) quanto a influência da curvatura da superfície (por meio do fator $\mu(r) = e^{\frac{\alpha}{4}e^{-2r^2/b^2}}$). A combinação dessas duas contribuições determina o perfil das funções de onda associadas a cada sub-rede.

6.5 Densidades de probabilidades

A partir dessas soluções analíticas, é possível plotar os gráficos das amplitudes de probabilidade $|\psi_A(r)|^2$ e $|\psi_B(r)|^2$, permitindo uma análise detalhada do comportamento do elétron ao se propagar sobre a superfície curva. Tais gráficos revelam como a geometria e o campo magnético interagem para moldar a distribuição espacial dos modos ligados, além de ilustrar como a curvatura pode favorecer a ocupação em uma sub-rede específica em função de m , mesmo sob a ação de um campo de confinamento externo.

Gráfico 24: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = 1/2$ no caso da Gaussiana.

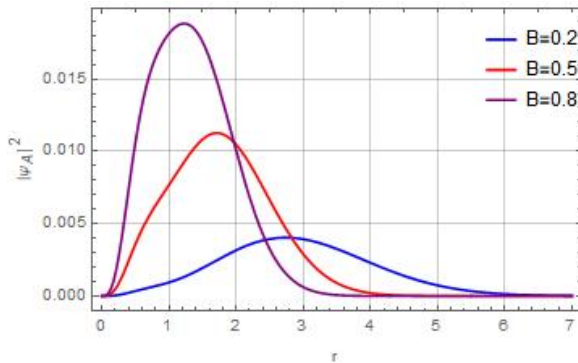
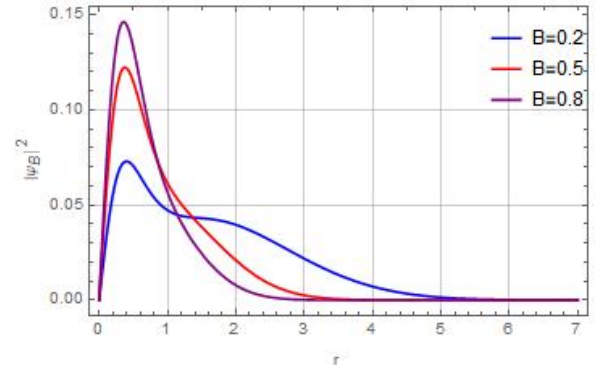


Gráfico 25: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = 1/2$ no caso da Gaussiana.



A partir dos gráficos de densidade de probabilidade apresentados, é possível ob-

Gráfico 26: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = 1/2$ no caso do vulcão.

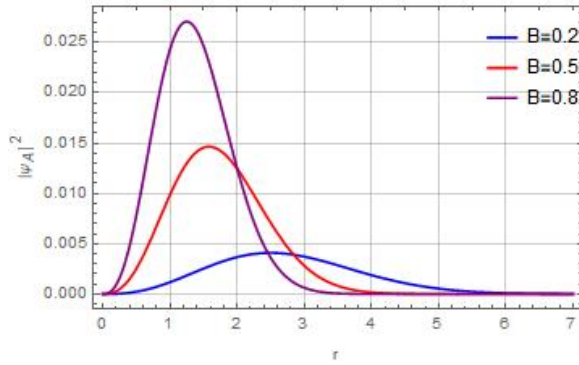


Gráfico 27: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = 1/2$ no caso do vulcão.

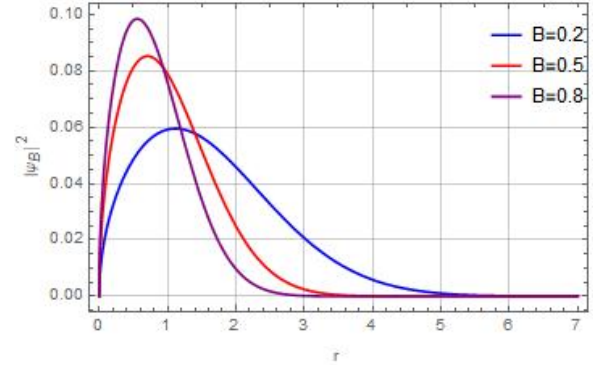


Gráfico 28: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = -1/2$ no caso da Gaussiana.

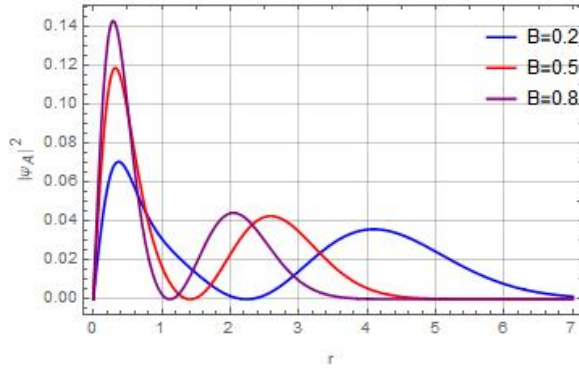


Gráfico 29: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = -1/2$ no caso da Gaussiana.

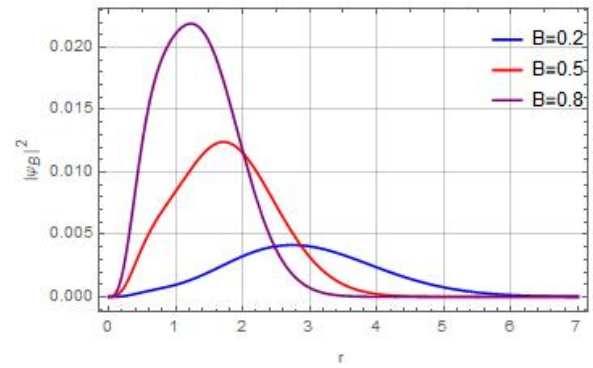


Gráfico 30: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede A para $m = -1/2$ no caso do vulcão.

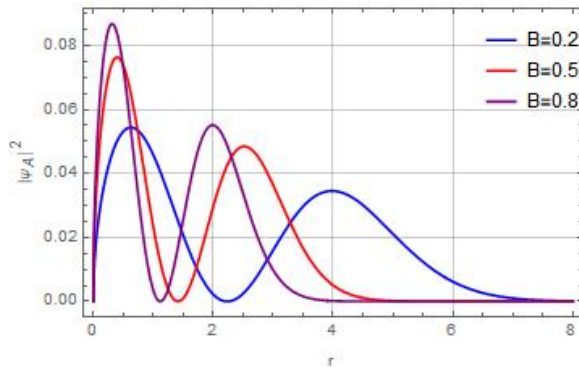
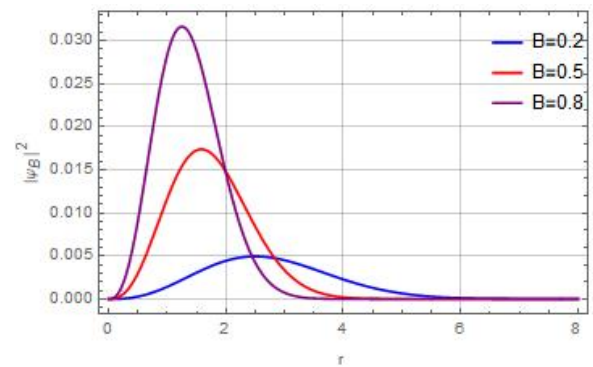


Gráfico 31: A densidade de probabilidade de encontrar o elétron na sub-rede B para $m = -1/2$ no caso do vulcão.



servar claramente o impacto combinado da curvatura da superfície e da intensidade do campo magnético externo sobre a localização espacial dos estados eletrônicos. Para diferentes valores do momento angular quântico m , vemos que a densidade de probabilidade se concentra mais intensamente em uma das sub-redes (A ou B), evidenciando a dependência da distribuição eletrônica em relação ao sinal de m . Especificamente, para $m = \pm 1/2$, os elétrons tendem a

ocupar preferencialmente a sub-rede associada ao sinal oposto do momento angular, mantendo o comportamento assimétrico já observado na ausência do campo externo. Esta assimetria entre ψ_A e ψ_B é preservada mesmo na presença de campos magnéticos intensos, sugerindo que a curvatura ainda exerce papel significativo na modulação da função de onda dos férmions de Dirac.

Além disso, um efeito notável da presença do campo magnético é o estreitamento progressivo das distribuições de probabilidade à medida que B aumenta. Isso é especialmente visível nas comparações entre os gráficos para $B = 0.2$, $B = 0.5$ e $B = 0.8$. Para campos fracos, a densidade de probabilidade se estende por uma região radial mais ampla, resultando em picos menores e perfis mais espalhados. À medida que o campo se intensifica, as curvas se tornam mais altas e mais próximas da origem, indicando um maior grau de confinamento espacial. Tal comportamento é consistente com a interpretação dos potenciais efetivos quadráticos analisados anteriormente, que revelam a presença de poços de potencial mais profundos e estreitos para maiores valores de B . Em outras palavras, o campo magnético externo atua como uma armadilha mais eficiente, reduzindo o volume efetivo no qual os elétrons podem se propagar, independentemente da geometria considerada, seja ela do tipo gaussiana ou do tipo vulcão.

Gráfico 32: Densidade de probabilidade total para $m = \frac{1}{2}$ no caso da Gaussiana.

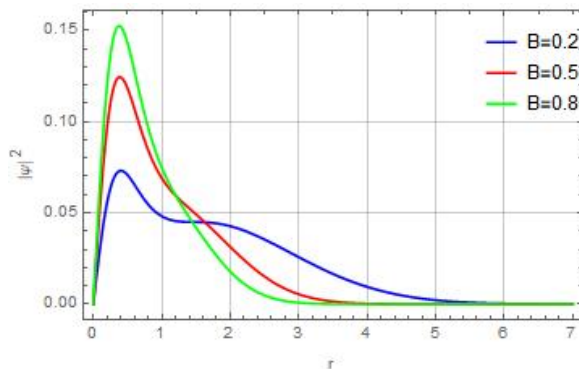
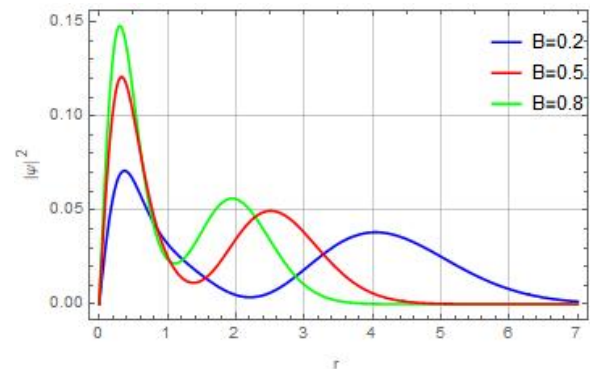


Gráfico 33: Densidade de probabilidade total para $m = -\frac{1}{2}$ no caso da Gaussiana.



Os gráficos 32–35 mostram a densidade de probabilidade total $\rho(r) = |\psi_A(r)|^2 + |\psi_B(r)|^2$ para diferentes valores de m e de campo magnético externo B , nas duas geometrias analisadas: a superfície Gaussiana e a do tipo vulcão. A obtenção dessa densidade é fisicamente válida pois, como demonstrado nas seções anteriores, o campo magnético induz a formação de estados ligados. Isso se manifesta matematicamente pela normalizabilidade das soluções, que se anulam no infinito e possuem norma finita, o que justifica o cálculo de $\rho(r)$ e permite descrever a distribuição espacial da probabilidade de encontrar o elétron.

Outro aspecto fundamental é o efeito do campo magnético externo B na distribuição radial da densidade. À medida que B aumenta, a curva de $\rho(r)$ se torna mais estreita e seu pico se desloca para valores menores de r , indicando que o campo atua como uma armadilha magnética mais intensa. Isso é evidenciado nos gráficos, nos quais a densidade se torna mais localizada em torno da origem com o aumento de B , embora nunca atinja exatamente $r = 0$ devido à presença de uma barreira centrífuga ou do pseudo-potencial de gauge divergente. Quando B é pequeno, a densidade se espalha em uma região mais ampla, revelando estados fracamente confinados.

Gráfico 34: Densidade de probabilidade total para $m = \frac{1}{2}$ no caso da superfície tipo vulcão.

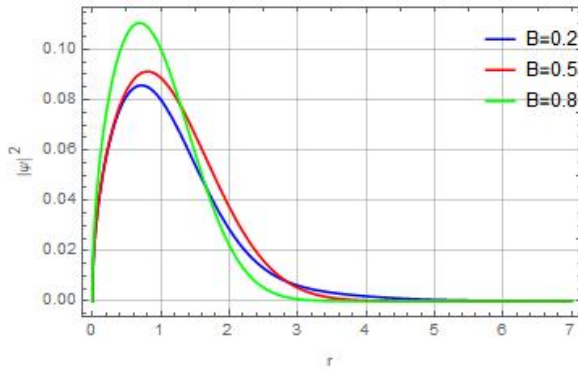
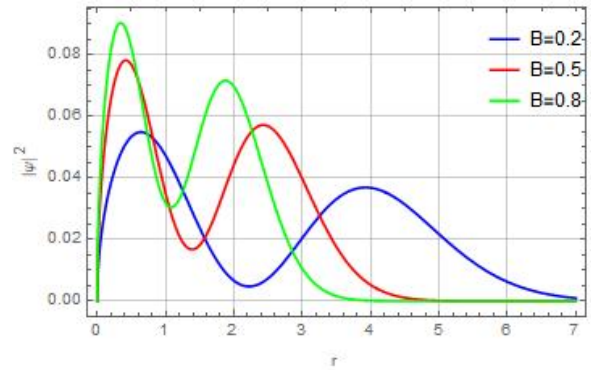


Gráfico 35: Densidade de probabilidade total para $m = -\frac{1}{2}$ no caso da superfície tipo vulcão.



Tanto na superfície Gaussiana quanto na do tipo vulcão, o comportamento de $\rho(r)$ reflete a competição entre três fatores: a curvatura localizada, o potencial centrífugo e o campo magnético. Enquanto a curvatura tenderia a atrair os elétrons para regiões de maior curvatura (por exemplo, $r = 0$ na Gaussiana), o termo centrífugo ($\sim m^2/r^2$) e o pseudo-potencial A_θ criam barreiras em torno da origem, impedindo a ocupação direta do centro. Como resultado, a densidade assume a forma de um anel em torno da origem, cujo raio diminui com o aumento de B , mas nunca a anula completamente. Esse padrão é uma assinatura clara da simetria axial das superfícies e da natureza quantizada dos estados de Landau em grafeno curvo.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, investigamos a influência da curvatura localizada na dinâmica de férmions de Dirac sem massa em folhas de grafeno, considerando cenários com e sem a presença de um campo magnético externo. Para isso, acoplamos a equação de Dirac a superfícies curvas com simetria axial, modeladas com perfis do tipo Gaussiano e vulcão. Nesses contextos geométricos, mostramos que a curvatura modifica substancialmente a propagação dos férmions, alterando sua densidade de probabilidade e quebrando a simetria entre as sub-redes, como já indicado em trabalhos anteriores [13].

A abordagem analítica adotada baseou-se na reescrita da solução espinorial como o produto $\psi = \mu(r) \cdot \chi(r)$, onde a função $\mu(r)$ capta o efeito de fase induzido exclusivamente pela geometria, por meio do pseudo-potencial de gauge $A_\theta(r)$. Essa estrutura funcional revelou que a curvatura gera um termo de fase análogo ao efeito Aharonov-Bohm, mas de origem puramente geométrica, como discutido em [25,85]. Tal fase geométrica afeta significativamente o comportamento dos férmions, especialmente a localização espacial das suas amplitudes de probabilidade.

No caso sem campo magnético, observamos que não há formação de estados ligados, e os elétrons permanecem livres para se espalhar sobre a superfície, apresentando densidades de probabilidade contínuas e não normalizáveis. Em contraste, com a introdução de um campo magnético externo constante, surgem estados quantizados de energia, os níveis de Landau, e as soluções passam a ser normalizáveis. Isso evidencia a formação de estados ligados, com confinamento efetivo promovido pela interação entre o campo e a curvatura local da superfície.

Um dos aspectos mais marcantes dos resultados obtidos foi a forte dependência da densidade de probabilidade em relação ao parâmetro m , correspondente ao momento angular total na direção z . Esse parâmetro revelou-se fundamental na determinação da ocupação preferencial de uma das sub-redes do grafeno. Observou-se uma assimetria pronunciada entre as componentes ψ_A e ψ_B , cuja distribuição espacial variou significativamente com o sinal de m . Isso reforça o papel da geometria como elemento ativo no controle de estados fermiônicos.

Além disso, os perfis de densidade de probabilidade total $\rho(r)$ demonstraram que, embora a curvatura geométrica tenha seu máximo na origem (no caso da superfície Gaussiana), os elétrons não se localizam exatamente em $r = 0$ devido à presença de termos centrífugos e pseudopotenciais divergentes. Como consequência, a densidade assume a forma de um anel ao redor da origem, cujo raio depende tanto de m quanto da intensidade do campo magnético. O campo B atua como uma armadilha, estreitando a distribuição radial e promovendo maior confinamento à medida que sua intensidade aumenta.

Como perspectiva futura, pretendemos expandir este estudo para além do caso de um único férmion, investigando um sistema de gás de férmions relativísticos não interagentes em superfícies curvas. Especificamente, exploraremos situações nas quais os férmions interagem com múltiplos ripples dinâmicos, representando uma geometria mais complexa e realista do grafeno deformado. Essa generalização permitirá estudar propriedades coletivas emergen-

tes, como modulações na densidade de estados, efeitos quânticos de interferência entre regiões curvas e o papel de curvaturas múltiplas no controle eletrônico em materiais bidimensionais.

REFERÊNCIAS

- [1] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Physical review*, APS, v. 71, n. 9, p. 622, 1947.
- [2] BOEHM, H.-P. et al. Dünnsche kohlenstoff-folien. *Zeitschrift Für Naturforschung B*, Verlag der Zeitschrift für Naturforschung, v. 17, n. 3, p. 150–153, 1962.
- [3] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- [4] GEIM, A.; NOVOSELOV, K. Graphene calling. *Nat. Mater*, v. 6, n. 169, p. 10–1038, 2007.
- [5] GEIM, A. K. Graphene: status and prospects. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 324, n. 5934, p. 1530–1534, 2009.
- [6] KATSNELSON, M. I. *The physics of graphene*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2020.
- [7] GEHA, A. G.; NADIAYE, M. B. et al. Graphene, a material with exceptional electronic properties. *arXiv preprint arXiv:2402.00599*, 2024.
- [8] ABERGEL, D. et al. Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 59, n. 4, p. 261–482, 2010.
- [9] COOPER, D. R. et al. Experimental review of graphene. *International Scholarly Research Notices*, Wiley Online Library, v. 2012, n. 1, p. 501686, 2012.
- [10] ALLEN, M. J.; TUNG, V. C.; KANER, R. B. Honeycomb carbon: a review of graphene. *Chemical reviews*, ACS Publications, v. 110, n. 1, p. 132–145, 2010.
- [11] MEYER, J. C. et al. The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 446, n. 7131, p. 60–63, 2007.
- [12] MEYER, J. C. et al. On the roughness of single-and bi-layer graphene membranes. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 143, n. 1-2, p. 101–109, 2007.
- [13] JUAN, F. de; CORTIJO, A.; VOZMEDIANO, M. A. Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 76, n. 16, p. 165409, 2007.
- [14] SUTTER, J.; HYBERTSEN, J. Sadowski, and e. sutter. *Phys. Rev. B*, v. 80, n. 245411, p. 1601, 2009.
- [15] ISHIGAMI, M. et al. Atomic structure of graphene on sio2. *Nano letters*, ACS Publications, v. 7, n. 6, p. 1643–1648, 2007.
- [16] SEUNG, H. S.; NELSON, D. R. Defects in flexible membranes with crystalline order. *Physical Review A*, APS, v. 38, n. 2, p. 1005, 1988.
- [17] MONTEIRO, L.; ALMEIDA, C.; SILVA, J. Dirac fermions on wires confined to the graphene möbius strip. *Physical Review B*, APS, v. 108, n. 11, p. 115436, 2023.

- [18] JUAN, F. de; STURLA, M.; VOZMEDIANO, M. A. Space dependent fermi velocity in strained graphene. *Physical review letters*, APS, v. 108, n. 22, p. 227205, 2012.
- [19] VOZMEDIANO, M. A. H.; JUAN, F. de; CORTIJO, A. Gauge fields and curvature in graphene. In: *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.: s.n.], 2008. v. 129, n. 1, p. 012001.
- [20] HAYASHI, M.; INAGAKI, T. Curvature and topological effects on dynamical symmetry breaking in a four-and eight-fermion interaction model. *International Journal of Modern Physics A*, World Scientific, v. 25, n. 17, p. 3353–3374, 2010.
- [21] BATISTA JÚNIOR, F. B. et al. Curvature effects on the electronic and transport properties of semiconductor films. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 99, p. 304–309, 2018.
- [22] KOTHARI, M. et al. Critical curvature localization in graphene. ii. non-local flexoelectricity–dielectricity coupling. *Proceedings of the Royal Society A*, The Royal Society Publishing, v. 475, n. 2221, p. 20180671, 2019.
- [23] YAN, W. et al. Strain and curvature induced evolution of electronic band structures in twisted graphene bilayer. *Nature communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 4, n. 1, p. 2159, 2013.
- [24] YANG, M. et al. Electronic scattering of pseudo-magnetic field induced by local bump in graphene. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 112, n. 7, 2012.
- [25] 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.
- [26] ATANASOV, V.; SAXENA, A. Helicoidal graphene nanoribbons: Chiraltronics. *Physical Review B*, APS, v. 92, n. 3, p. 035440, 2015.
- [27] SILVA, J. et al. Electronic properties of bilayer graphene catenoid bridge. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 384, n. 25, p. 126458, 2020.
- [28] YEŞİLTAŞ, Ö.; FURTADO, J.; SILVA, J. E. G. d. Dirac equation on a catenoid bridge: a supersymmetric approach. *The European Physical Journal Plus*, Springer, v. 137, n. 4, p. 1–12, 2022.
- [29] BUENO, M.; FURTADO, C.; CARVALHO, A. de M. Landau levels in graphene layers with topological defects. *The European Physical Journal B*, Springer, v. 85, p. 1–5, 2012.
- [30] VILLALBA, V. M.; MAGGIOLO, A. R. Energy spectrum of a 2d dirac electron in the presence of a constant magnetic field. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 22, p. 31–35, 2001.
- [31] ARMANO, A.; AGNELLO, S. Two-dimensional carbon: a review of synthesis methods, and electronic, optical, and vibrational properties of single-layer graphene. *C, MDPI*, v. 5, n. 4, p. 67, 2019.
- [32] KITTEL, C.; MCEUEN, P. *Introduction to solid state physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2018.
- [33] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. Solid state. *Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston) Appendix C*, v. 1, 1976.
- [34] SRIVASTAVA, J. *Elements of solid state physics*. [S.l.]: PHL Learning Private Limited, 2017.

- [35] SPYROU, K.; RUDOLF, P. An introduction to graphene. *Functionalization of graphene*, Wiley Online Library, p. 1–20, 2014.
- [36] DARTORA, C.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. Os fundamentos da física dos férmions de dirac sem massa em $(1+2)$ -d e o grafeno. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 37, p. 3301–1, 2015.
- [37] PROCTOR, J. E.; ARMADA, D. M.; VIJAYARAGHAVAN, A. *An introduction to graphene and carbon nanotubes*. [S.l.]: CRC Press, 2017.
- [38] FERRARI, A. C. et al. Raman spectrum of graphene and graphene layers. *Physical review letters*, APS, v. 97, n. 18, p. 187401, 2006.
- [39] MILOVANOVIĆ, M. Fractionalization in dimerized graphene and graphene bilayer. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 78, n. 24, p. 245424, 2008.
- [40] MOHR, M. et al. Two-dimensional electronic and vibrational band structure of uniaxially strained graphene from ab initio calculations. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 80, n. 20, p. 205410, 2009.
- [41] SUPRUN, A.; SHMELEVA, L. General dynamic properties of conduction electron within the first brillouin zone of graphene. *The European Physical Journal Plus*, Springer Berlin Heidelberg, v. 134, n. 1, p. 43, 2019.
- [42] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005.
- [43] KATSNELSON, M.; NOVOSELOV, K. Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 143, n. 1-2, p. 3–13, 2007.
- [44] DAS, A. *Lectures on quantum field theory*. [S.l.]: World Scientific, 2020.
- [45] RYDER, L. H. *Quantum field theory*. [S.l.]: Cambridge university press, 1996.
- [46] SHOKRI, B.; EGHBALI, A.; PHIROUZNI, A. Rkky interaction on curved surfaces: Different behavior of dirac and schrödinger carriers as interaction-mediating particles. *Physical Review B*, APS, v. 106, n. 19, p. 195426, 2022.
- [47] ALDROVANDI, R.; PEREIRA, J. An elementary introduction to classical fields. *Lecture notes. Instituto de Física Teórica Universida de Estadual Paulista Sao Paulo-Brazil*, 2019.
- [48] CARROLL, S. *Spacetime and Geometry: An Introduction to General Relativity (Ad dison-Wesley, San Francisco) p 1*. 2004.
- [49] SCHUTZ, B. *A first course in general relativity*. [S.l.]: Cambridge university press, 2022.
- [50] RESNICK, R. *Introduction to special relativity*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1991.
- [51] SCHWICHTENBERG, J. *Physics from symmetry*. [S.l.]: Springer, 2018.
- [52] NAKAHARA, M. *Geometry, topology and physics*. [S.l.]: CRC press, 2018.
- [53] RINDLER, W. *Introduction to special relativity*. 1991.

- [54] THORNE, K. S.; MISNER, C. W.; WHEELER, J. A. *Gravitation*. [S.l.]: Freeman San Francisco, 2000.
- [55] HARTLE, J. B. *Gravity: an introduction to Einstein's general relativity*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2021.
- [56] HOBSON, M. P.; EFSTATHIOU, G. P.; LASENBY, A. N. *General relativity: an introduction for physicists*. [S.l.]: Cambridge university press, 2006.
- [57] ZEE, A. *Einstein gravity in a nutshell*. [S.l.]: Princeton University Press, 2013. v. 14.
- [58] MARKOUTSAKIS, M. *Geometry, Symmetries, and Classical Physics: A Mosaic*. [S.l.]: CRC Press, 2021.
- [59] PADMANABHAN, T. *Gravitation: foundations and frontiers*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [60] WALD, R. M. *General relativity*. [S.l.]: University of Chicago press, 2010.
- [61] RYDER, L. *Introduction to general relativity*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.
- [62] LUDVIGSEN, M. *General relativity: a geometric approach*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- [63] CHENG, T.-P. *Relativity, gravitation and cosmology: a basic introduction*. [S.l.]: Oxford University Press, 2009. v. 11.
- [64] PLEBANSKI, J.; KRASINSKI, A. *An introduction to general relativity and cosmology*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2024.
- [65] OLPAK, M. A. Dirac equation on a curved $(2+1)$ -dimensional hypersurface. *Modern Physics Letters A*, World Scientific, v. 27, n. 03, p. 1250016, 2012.
- [66] GALLERATI, A. Graphene properties from curved space dirac equation. *The European Physical Journal Plus*, Springer Berlin Heidelberg, v. 134, n. 5, p. 202, 2019.
- [67] BIRRELL, N. D.; DAVIES, P. C. W. *Quantum fields in curved space*. Cambridge university press, 1984.
- [68] FORD, L. H. D3: Quantum field theory in curved spacetime. *General Relativity and Gravitation*, World Scientific, p. 490–493, 2002.
- [69] PARKER, L.; TOMS, D. *Quantum field theory in curved spacetime: quantized fields and gravity*. [S.l.]: Cambridge university press, 2009.
- [70] DEWITT, B. S. Quantum field theory in curved spacetime. *Physics Reports*, Elsevier, v. 19, n. 6, p. 295–357, 1975.
- [71] ALDROVANDI, R.; PEREIRA, J. G. *An Introduction to General Relativity*. Instituto de Física Teórica, UNESP, 2016. Disponível em: <https://professores.ift.unesp.br/jg.pereira/igr.pdf>.
- [72] WELDON, H. A. Fermions without vierbeins in curved space-time. *Physical Review D*, APS, v. 63, n. 10, p. 104010, 2001.
- [73] GARLING, D. J. *Clifford algebras: an introduction*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. v. 78.

- [74] JR, J. V.; JR, R. da R. *An introduction to Clifford algebras and spinors*. [S.l.]: Oxford University Press, 2016.
- [75] FRANKEL, T. *The geometry of physics: an introduction*. [S.l.]: Cambridge university press, 2011.
- [76] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; HARRIS, F. E. *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. [S.l.]: Academic press, 2011.
- [77] STEPHANI, H. *Relativity: An introduction to special and general relativity*. [S.l.]: Cambridge university press, 2004.
- [78] JOST, J.; JOST, J. *Riemannian geometry and geometric analysis*. [S.l.]: Springer, 2008. v. 42005.
- [79] GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to quantum mechanics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2019.
- [80] SHANKAR, R. *Principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- [81] PERES, A. *Quantum theory: concepts and methods*. [S.l.]: Springer, 2002.
- [82] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics, volume 1. *Quantum Mechanics*, v. 1, p. 898, 1986.
- [83] NEUMANN, J. V. *Mathematical foundations of quantum mechanics: New edition*. [S.l.]: Princeton university press, 2018.
- [84] DIRAC, P. A. M. *The principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Oxford university press, 1981.
- [85] SILVA, J. et al. Strain effects on the electronic properties of a graphene wormhole. *The European Physical Journal Plus*, Springer, v. 139, n. 8, p. 762, 2024.
- [86] BUTKOV, E. *Mathematical Physics Addison*. [S.l.]: Wesley Publishing Co., Reading, Mass, 1968.
- [87] HO, J. et al. Landau levels in graphene. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 40, n. 5, p. 1722–1725, 2008.
- [88] GOERBIG, M. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 83, n. 4, p. 1193–1243, 2011.
- [89] PORTEOUS, I. R. *Clifford algebras and the classical groups*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995.
- [90] GEORGI, H.; SLANSKY, R. *Lie algebras in particle physics*. [S.l.]: American Institute of Physics, 1983.
- [91] HUMPHREYS, J. E. *Introduction to Lie algebras and representation theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 9.
- [92] KIRILLOV, A. A. *An introduction to Lie groups and Lie algebras*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2008. v. 113.
- [93] ANKER, J.-P.; ORSTED, B. *Lie theory: Lie algebras and representations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2004. v. 1.

APÊNDICE A – SÍMBOLOS DE CHRISTOFFEL

Neste apêndice, apresentamos o cálculo explícito dos *símbolos de Christoffel* para o caso de um espaço plano em coordenadas polares (t, r, θ) . Trata-se do sistema de coordenadas natural para problemas com simetria circular, mesmo na ausência de curvatura.

Espaço Plano

A métrica espaço-tempo considerada é:

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - r^2 d\theta^2. \quad (1)$$

O tensor métrico $g_{\mu\nu}$ assume a forma:

$$g_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

cuja inversa é dada por

$$g^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{r^2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Focaremos nas componentes espaciais (r, θ) . A parte espacial da métrica é:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Cálculos de $\Gamma_{\mu\nu}^\rho$

Os símbolos de Christoffel são dados por:

$$\Gamma_{\mu\nu}^\rho = \frac{1}{2} g^{\rho\lambda} (\partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\mu\lambda} - \partial_\lambda g_{\mu\nu}) \quad (5)$$

Consideremos a fórmula:

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = \frac{1}{2} g^{rr} (\partial_\theta g_{\theta r} + \partial_\theta g_{\theta r} - \partial_r g_{\theta\theta}). \quad (6)$$

Como $g_{\theta r} = g_{r\theta} = 0$ e $g_{\theta\theta} = -r$, temos:

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = -\frac{1}{2} g^{rr} \partial_r g_{\theta\theta} = -\frac{1}{2} (-1) (-2r) = -r. \quad (7)$$

Ao calcular Γ_{rr}^r , temos

$$\Gamma_{rr}^r = \frac{g^{rr}}{2} (\partial_r g_{rr} + \partial_r g_{rr} - \partial_r g_{rr}) = 0. \quad (8)$$

Consideremos ainda calcular $\Gamma_{r\theta}^r = \Gamma_{\theta r}^r$, temos

$$\Gamma_{r\theta}^r = \frac{g^{rr}}{2} (\partial_\theta g_{rr} + \partial_r g_{r\theta} - \partial_r g_{r\theta}) = 0. \quad (9)$$

Agora vamos obter $\Gamma_{\theta\theta}^\theta$, temos então

$$\Gamma_{\theta\theta}^\theta = \frac{g^{\theta\theta}}{2} (\partial_\theta g_{\theta\theta} + \partial_\theta g_{\theta\theta} - \partial_\theta g_{\theta\theta}) = 0. \quad (10)$$

Vamos calcular agora $\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta$. Sabemos que $\partial_r g_{\theta\theta} = -2r$, logo:

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \frac{1}{2} g^{\theta\theta} \partial_r g_{\theta\theta} = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{r^2} \right) (-2r) = \frac{1}{r} \quad (11)$$

Portanto:

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r} \quad (12)$$

Por último vamos obter Γ_{rr}^θ :

$$\Gamma_{rr}^\theta = \frac{g^{\theta\theta}}{2} (\partial_r g_{r\theta} + \partial_r g_{r\theta} - \partial_\theta g_{rr}) = 0. \quad (13)$$

Desse modo, temos

$$\boxed{\Gamma_{\theta\theta}^r = -r}, \quad \boxed{\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}} \quad (14)$$

Espaço Curvo

Calculamos agora os símbolos de Christoffel associados à parte espacial da métrica efetiva induzida pela curvatura da superfície sobre a qual o elétron se propaga. A métrica do espaço-tempo considerada é do tipo:

$$ds^2 = dt^2 - (1 + \alpha f(r)) dr^2 - r^2 d\theta^2, \quad (15)$$

A métrica completa do espaço-tempo, considerando coordenadas (t, r, θ) , é:

$$g_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -(1 + \alpha f(r)) & 0 \\ 0 & 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (16)$$

No entanto, para a construção do Hamiltoniano de Dirac na superfície bidimensional, consideramos apenas a parte espacial da métrica:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} -(1 + \alpha f(r)) & 0 \\ 0 & -r^2 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

com $i, j \in \{r, \theta\}$. O inverso da métrica é, portanto:

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} -(1 + \alpha f(r))^{-1} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{r^2} \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Cálculos de $\Gamma_{\mu\nu}^\rho$ geral

Os símbolos de Christoffel são definidos por meio da expressão:

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{k\ell} (\partial_i g_{j\ell} + \partial_j g_{i\ell} - \partial_\ell g_{ij}). \quad (19)$$

Sabendo que $g_{rr} = -(1 + \alpha f(r))$, $g_{\theta r} = g_{r\theta} = 0$ e $g_{\theta\theta} = -r^2$, vamos agora calcular cada componente não nula de forma detalhada:

Cálculo de Γ_{rr}^r :

$$\begin{aligned} \Gamma_{rr}^r &= \frac{1}{2} g^{rr} (\partial_r g_{rr} + \partial_r g_{rr} - \partial_r g_{rr}) \\ &= \frac{1}{2} g^{rr} \partial_r g_{rr} = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{1 + \alpha f(r)} \right) \cdot (-\alpha f'(r)) \\ &= \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))}. \end{aligned} \quad (20)$$

Cálculo de $\Gamma_{\theta\theta}^r$:

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = \frac{1}{2} g^{rr} (\partial_\theta g_{\theta r} + \partial_\theta g_{r\theta} - \partial_r g_{\theta\theta}). \quad (21)$$

Como $g_{\theta r} = 0$ e $\partial_r g_{\theta\theta} = \partial_r(-r^2) = -2r$, segue:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\theta\theta}^r &= -\frac{1}{2} g^{rr} \partial_r g_{\theta\theta} = -\frac{1}{2} \left(-\frac{1}{1 + \alpha f(r)} \right) \cdot (-2r) \\ &= -\frac{r}{1 + \alpha f(r)}. \end{aligned} \quad (22)$$

Cálculo de $\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta$:

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \frac{1}{2} g^{\theta\theta} (\partial_r g_{\theta\theta} + \partial_\theta g_{r\theta} - \partial_\theta g_{r\theta}) = \frac{1}{2} g^{\theta\theta} \partial_r g_{\theta\theta}. \quad (23)$$

Desse modo, chegamos à

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{r^2} \right) \cdot (-2r) = \frac{1}{r}. \quad (24)$$

Cálculo de $\Gamma_{r\theta}^r = \Gamma_{\theta r}^r$

$$\begin{aligned} \Gamma_{r\theta}^r &= \frac{1}{2} g^{rr} (\partial_r g_{\theta r} + \partial_\theta g_{rr} - \partial_r g_{r\theta}) = \frac{1}{2} g^{rr} (\partial_\theta g_{rr}) \\ &= \frac{1}{2} g^{rr} \cdot 0 = \Gamma_{\theta r}^r = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Cálculo de $\Gamma_{\theta\theta}^\theta$

$$\begin{aligned}\Gamma_{\theta\theta}^\theta &= \frac{1}{2}g^{\theta\theta}(\partial_\theta g_{\theta\theta} + \partial_\theta g_{\theta\theta} - \partial_\theta g_{\theta\theta}) \\ &= \frac{1}{2}g^{\theta\theta} \cdot \partial_\theta g_{\theta\theta} = \frac{1}{2}g^{\theta\theta} \cdot 0 = 0.\end{aligned}\tag{26}$$

Cálculo de Γ_{rr}^θ

$$\begin{aligned}\Gamma_{rr}^\theta &= \frac{1}{2}g^{\theta\theta}(\partial_r g_{r\theta} + \partial_r g_{r\theta} - \partial_\theta g_{rr}) = \frac{1}{2}g^{\theta\theta}(0 + 0 - \partial_\theta g_{rr}) \\ &= -\frac{1}{2}g^{\theta\theta} \cdot \partial_\theta g_{rr} = 0\end{aligned}\tag{27}$$

Em resumo, temos os seguintes fatores geométricos:

$$\boxed{\Gamma_{rr}^r = \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))}},\tag{28}$$

$$\boxed{\Gamma_{\theta\theta}^r = -\frac{r}{(1 + \alpha f(r))}},\tag{29}$$

$$\boxed{\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}}.\tag{30}$$

APÊNDICE B – CONEXÃO DE SPIN

Este apêndice apresenta o cálculo detalhado da conexão de spin em duas situações distintas: (i) no caso plano, ou seja, na ausência de curvatura, e (ii) na presença de curvatura induzida pela geometria da superfície. O objetivo é ilustrar, passo a passo, como obter os termos de conexão de spin Ω_μ a partir dos vierbeins e dos símbolos de Christoffel, conforme exigido na formulação do Hamiltoniano de Dirac em espaços curvos.

Conexão de Spin no Espaço Plano

Na ausência de curvatura, utilizamos coordenadas polares (r, θ) , para as quais os símbolos de Christoffel não nulos são:

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = -r, \quad \Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}. \quad (\text{A.1})$$

A conexão de spin Ω_μ é dada por:

$$\Omega_\mu = \frac{1}{8} \omega_\mu^{ab} [\gamma_a, \gamma_b], \quad (\text{A.2})$$

onde os coeficientes de spin ω_μ^{ab} são calculados a partir da fórmula:

$$\omega_\mu^{ab} = e_\nu^a \left(\partial_\mu e^{\nu b} + \Gamma_{\mu\lambda}^\nu e^{\lambda b} \right), \quad (\text{A.3})$$

sendo e_μ^a a matriz vierbein.

Vierbein para o Espaço Plano

Escolhemos a seguinte matriz vierbein diagonal, compatível com a métrica plana em coordenadas polares:

$$e_\mu^a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

cujas inversas são dadas por

$$e_a^\mu = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Temos portanto

$$e_r^1 = 1; \quad e_\theta^1 = 0; \quad e_r^2 = 0; \quad e_\theta^2 = r \quad (\text{A.6})$$

$$e_1^r = 1; \quad e_2^r = 0; \quad e_1^\theta = 0; \quad e_2^\theta = \frac{1}{r} \quad (\text{A.7})$$

Cálculo da Conexão Ω_r

Começamos com o componente radial da conexão de spin:

$$\Omega_r = \frac{1}{8} \omega_r^{ab} [\gamma_a, \gamma_b]. \quad (\text{A.8})$$

Vamos calcular explicitamente os termos de ω_r^{ab} :

Termo ω_r^{11} :

$$\begin{aligned}\omega_r^{11} &= e_v^1 \left(\partial_r e^{v1} + \Gamma_{r\lambda}^v e^{\lambda 1} \right) = e_r^1 \left(\partial_r e^{r1} + \Gamma_{r\lambda}^r e^{\lambda 1} \right) \\ &= e_r^1 \left(\partial_r e^{r1} + \Gamma_{rr}^r e^{r1} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 1} \right) = 0\end{aligned}\tag{A.9}$$

Termo ω_r^{22} :

$$\begin{aligned}\omega_r^{22} &= e_v^2 \left(\partial_r e^{v2} + \Gamma_{r\lambda}^v e^{\lambda 2} \right) = e_\theta^2 \left(\partial_r e^{\theta 2} + \Gamma_{r\lambda}^\theta e^{\lambda 2} \right) \\ &= e_\theta^2 \left(\partial_r e^{\theta 2} + \Gamma_{rr}^\theta e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) = \eta^{22} e_\theta^2 \left(\partial_r e_2^\theta + \Gamma_{r\theta}^\theta e_2^\theta \right) = 0\end{aligned}\tag{A.10}$$

Termo $\omega_r^{12} = -\omega_r^{21}$:

$$\begin{aligned}\omega_r^{12} &= e_v^1 \left(\partial_r e^{v2} + \Gamma_{r\lambda}^v e^{\lambda 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{r\lambda}^r e^{\lambda 2} \right) \\ &= e_r^1 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{rr}^r e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 2} \right) \\ &= \eta^{22} e_r^1 \left(\partial_r e_2^r + \Gamma_{r\theta}^r e_2^\theta \right) = -\omega_r^{21} = 0\end{aligned}\tag{A.11}$$

Portanto, todos os componentes ω_r^{ab} são nulos e concluímos que:

$$\Omega_r = 0.\tag{A.12}$$

Cálculo da Conexão Ω_θ

Agora calculamos o componente angular da conexão de spin:

$$\Omega_\theta = \frac{1}{8} \omega_\theta^{ab} [\gamma_a, \gamma_b].\tag{A.13}$$

Termo ω_θ^{11} :

$$\begin{aligned}\omega_\theta^{11} &= e_v^1 \left(\partial_\theta e^{v1} + \Gamma_{\theta\lambda}^v e^{\lambda 1} \right) = e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r1} + \Gamma_{\theta\lambda}^r e^{\lambda 1} \right) \\ &= e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r1} + \Gamma_{\theta r}^r e^{r1} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 1} \right) = e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r1} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 1} \right) = 0\end{aligned}\tag{A.14}$$

Termo ω_θ^{22} :

$$\begin{aligned}\omega_\theta^{22} &= e_v^2 \left(\partial_\theta e^{v2} + \Gamma_{\theta\lambda}^v e^{\lambda 2} \right) = e_\theta^2 \left(\partial_\theta e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta\lambda}^\theta e^{\lambda 2} \right) \\ &= e_\theta^2 \left(\partial_\theta e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) = e_\theta^2 \left(\partial_\theta e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^\theta e^{r2} \right) = 0\end{aligned}\tag{A.15}$$

Termo $\omega_\theta^{12} == -\omega_\theta^{21}$:

$$\begin{aligned}\omega_\theta^{12} &= e_\nu^1 \left(\partial_\theta e^{\nu 2} + \Gamma_{\theta\lambda}^\nu e^{\lambda 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta\lambda}^r e^{\lambda 2} \right) \\ &= e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta r}^r e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) \\ &= \eta^{22} e_r^1 \left(\partial_r e_2^\theta + \Gamma_{r\theta}^r e_2^\theta \right) = -\omega_\theta^{21} = 1\end{aligned}\quad (\text{A.16})$$

Portanto, obtemos:

$$\Omega_\theta = \frac{1}{4} \omega_\theta^{12} [\gamma_1, \gamma_2] = \frac{1}{2} \omega_\theta^{12} \gamma_1 \gamma_2 = \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2. \quad (\text{A.17})$$

Se utilizarmos a representação dada pela Eq.3.39 das γ -matrizes bidimensionais, obtemos

$$\Omega_\theta = \frac{i}{2} \sigma_3. \quad (\text{A.18})$$

Conexão de Spin para o espaço curvo.

Para incorporar os efeitos da curvatura espacial na dinâmica dos férmions, é necessário introduzir a conexão de spin (*spin connection*). Esta conexão está diretamente relacionada à conexão de Levi-Civita via os símbolos de Christoffel, que expressam as propriedades geométricas da variedade curva.

No caso da métrica com simetria axial considerada, os símbolos de Christoffel não nulos são:

$$\Gamma_{rr}^r = \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))}, \quad (\text{A.19})$$

$$\Gamma_{\theta\theta}^r = -\frac{r}{(1 + \alpha f(r))}, \quad (\text{A.20})$$

$$\Gamma_{r\theta}^\theta = \Gamma_{\theta r}^\theta = \frac{1}{r}. \quad (\text{A.21})$$

Esses coeficientes refletem as modificações na geometria local induzidas pela curvatura da superfície, afetando diretamente os termos da equação de Dirac generalizada. Para calcular a conexão de spin, precisamos conhecer os vierbeins, que estabelecem a relação entre os sistemas de coordenadas curvilíneas (índices gregos) e os sistemas locais de referencial inercial (índices latinos).

Adotamos, então, a seguinte escolha para os vierbeins e_μ^a :

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} (1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \cos \theta & -r \sin \theta \\ (1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \sin \theta & r \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.22})$$

A matriz inversa, e_a^μ , que satisfaz $e_\mu^a e_a^\mu = \delta_b^a$, é dada por:

$$e_a^\mu = \begin{pmatrix} (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \cos \theta & (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta \\ -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\cos \theta}{r} \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

Explicitemos agora os componentes individuais dessas matrizes. Temos então

$$e_r^1 = (1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \cos \theta, \quad e_\theta^1 = -r \sin \theta. \quad (\text{A.24})$$

$$e_r^2 = (1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \sin \theta, \quad e_\theta^2 = r \cos \theta. \quad (\text{A.25})$$

Do mesmo modo,

$$e_1^r = (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \cos \theta, \quad e_2^r = (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta. \quad (\text{A.26})$$

$$e_1^\theta = -\frac{\sin \theta}{r}, \quad e_2^\theta = \frac{\cos \theta}{r}. \quad (\text{A.27})$$

Determinação de Ω_r .

Com essas expressões em mãos, podemos agora proceder ao cálculo explícito da conexão de spin ω_μ^{ab} . A fórmula geral para este cálculo é:

$$\omega_\mu^{ab} = e_\nu^a \left(\partial_\mu e^{\nu b} + \Gamma_{\mu\lambda}^\nu e^{\lambda b} \right). \quad (\text{A.28})$$

Cálculo de ω_r^{11}

$$\omega_r^{11} = e_\nu^1 \left(\partial_r e^{\nu 1} + \Gamma_{r\lambda}^\nu e^{\lambda 1} \right) = e_r^1 \left(\partial_r e^{r1} + \Gamma_{rr}^r e^{r1} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 1} \right) + e_\theta^1 \left(\partial_r e^{\theta 1} + \Gamma_{rr}^\theta e^{r1} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 1} \right), \quad (\text{A.29})$$

isso leva à

$$\begin{aligned} \omega_r^{11} &= e_r^1 \left(\partial_r e^{r1} + \Gamma_{rr}^r e^{r1} \right) + e_\theta^1 \left(\partial_r e^{\theta 1} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 1} \right) \\ &= \eta^{11} \left[e_r^1 \left(\partial_r e_1^r + \Gamma_{rr}^r e_1^r \right) + e_\theta^1 \left(\partial_r e_1^\theta + \Gamma_{r\theta}^\theta e_1^\theta \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Mas temos que

$$\begin{aligned} \partial_r e_1^r &= \partial_r \left[(1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \cos \theta \right] \\ &= -\frac{1}{2} (1 + \alpha f(r))^{-\frac{3}{2}} \alpha f'(r) \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

e

$$\partial_r e_1^\theta = \partial_r \left(-\frac{\sin \theta}{r} \right) = \frac{\sin \theta}{r^2}, \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned}
\omega_r^{11} &= \left[(1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \left(-\frac{1}{2} (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \alpha f'(r) \cos \theta + \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))^{3/2}} \cos \theta \right) \right. \\
&\quad \left. + (r \cos \theta) \left(\frac{1}{r^2} \sin \theta - \frac{1}{r^2} \sin \theta \right) \right] \\
&= \left[(1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \left(\frac{\alpha f'(r)}{(1 + \alpha f(r))^{3/2}} \cos \theta - \frac{1}{2} (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \alpha f'(r) \cos \theta \right) \right] \\
&= \left[(1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \cdot \left(\alpha f'(r) (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \cos \theta - \frac{1}{2} (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \alpha f'(r) \cos \theta \right) \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

Cálculo de ω_r^{22}

$$\begin{aligned}
\omega_r^{22} &= e_v^2 \left(\partial_r e^{v2} + \Gamma_{r\lambda}^v e^{\lambda 2} \right) = e_r^2 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{rr}^r e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_\theta^2 \left(\partial_r e^{\theta 2} + \Gamma_{rr}^\theta e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) \\
&= e_r^2 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{rr}^r e^{r2} \right) + e_\theta^2 \left(\partial_r e^{\theta 2} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) \\
&= \eta^{22} e_r^2 \left(\partial_r e_2^r + \Gamma_{rr}^r e_2^r \right) + \eta^{22} e_\theta^2 \left(\partial_r e_2^\theta + \Gamma_{r\theta}^\theta e_2^\theta \right).
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Mas temos que

$$\partial_r e_2^r = -\frac{1}{2} \alpha f'(r) (1 + \alpha f(r))^{-\frac{3}{2}} \sin \theta, \tag{A.34}$$

e

$$\partial_r e_2^\theta = -\frac{\cos \theta}{r^2}, \tag{A.35}$$

então

$$\begin{aligned}
\omega_r^{22} &= \left[(1 + \alpha f(r))^{1/2} \sin \theta \left(-\frac{1}{2} \alpha f'(r) (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \sin \theta + \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))^{3/2}} \sin \theta \right) \right. \\
&\quad \left. + r \cos \theta \left(-\frac{1}{r^2} \cos \theta + \frac{1}{r^2} \cos \theta \right) \right] = 0.
\end{aligned} \tag{A.36}$$

Cálculo de $\omega_r^{12} = -\omega_r^{21}$

$$\begin{aligned}
\omega_r^{12} &= e_v^1 \left(\partial_r e^{v2} + \Gamma_{r\lambda}^v e^{\lambda 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_r e^{r2} + \Gamma_{rr}^r e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_\theta^1 \left(\partial_r e^{\theta 2} + \Gamma_{rr}^\theta e^{r2} + \Gamma_{r\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) \\
&= e_r^1 \eta^{22} \left(\partial_r e_2^r + \Gamma_{rr}^r e_2^r \right) + e_\theta^1 \eta^{22} \left(\partial_r e_2^\theta + \Gamma_{r\theta}^\theta e_2^\theta \right).
\end{aligned} \tag{A.37}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
\omega_r^{12} &= \left[(1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \left(-\frac{1}{2} \alpha f'(r) (1 + \alpha f(r))^{-3/2} \sin \theta + \frac{\alpha f'(r)}{2(1 + \alpha f(r))^{3/2}} \sin \theta \right) \right. \\
&\quad \left. - r \sin \theta \left(-\frac{1}{r^2} \cos \theta + \frac{1}{r^2} \cos \theta \right) \right] = 0
\end{aligned}$$

Desse modo, podemos concluir que $\Omega_r = 0$.

Determinação de Ω_θ .

Cálculo de ω_θ^{11}

$$\begin{aligned}
\omega_{\theta}^{11} &= e_{\nu}^1 \left(\partial_{\theta} e^{\nu 1} + \Gamma_{\theta\lambda}^{\nu} e^{\lambda 1} \right) = e_r^1 \left(\partial_{\theta} e^{r1} + \Gamma_{\theta r}^r e^{r1} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 1} \right) + e_{\theta}^1 \left(\partial_{\theta} e^{\theta 1} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e^{r1} + \Gamma_{\theta\theta}^{\theta} e^{\theta 1} \right) \\
&= e_r^1 \left(\partial_{\theta} e^{r1} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 1} \right) + e_{\theta}^1 \left(\partial_{\theta} e^{\theta 1} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e^{\theta 1} \right) \\
&= \eta^{11} \left[e_r^1 \left(\partial_{\theta} e_1^r + \Gamma_{\theta\theta}^r e_1^{\theta} \right) + e_{\theta}^1 \left(\partial_{\theta} e_1^{\theta} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e_1^{\theta} \right) \right].
\end{aligned} \tag{A.38}$$

mas temos que

$$\partial_{\theta} e_1^r = -(1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta, \tag{A.39}$$

e

$$\partial_{\theta} e_1^{\theta} = -\frac{\cos \theta}{r}. \tag{A.40}$$

Desse modo,

$$\begin{aligned}
\omega_{\theta}^{11} &= (1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \left[-(1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta + \left(\frac{r}{1 + \alpha f(r)} \right) \left(\frac{\sin \theta}{r} \right) \right] \\
&\quad - r \sin \theta \left[-\frac{\cos \theta}{r} + \frac{1}{r} (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \cos \theta \right] \\
&= (1 + \alpha f(r))^{1/2} \cos \theta \left(-(1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta + \frac{\sin \theta}{1 + \alpha f(r)} \right) \\
&\quad + \sin \theta \cos \theta - (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta \cos \theta \\
&= \sin \theta \cos \theta - (1 + \alpha f(r))^{1/2} (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta \cos \theta + (1 + \alpha f(r))^{1/2} \frac{\sin \theta \cos \theta}{1 + \alpha f(r)} \\
&\quad - (1 + \alpha f(r))^{-1/2} \sin \theta \cos \theta \\
&= 0
\end{aligned} \tag{A.41}$$

Cálculo de ω_{θ}^{22}

$$\begin{aligned}
\omega_{\theta}^{22} &= e_{\nu}^2 \left(\partial_{\theta} e^{\nu 2} + \Gamma_{\theta\lambda}^{\nu} e^{\lambda 2} \right) = e_r^2 \left(\partial_{\theta} e^{r2} + \Gamma_{\theta r}^r e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_{\theta}^2 \left(\partial_{\theta} e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^{\theta} e^{\theta 2} \right) \\
&= e_r^2 \left(\partial_{\theta} e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_{\theta}^2 \left(\partial_{\theta} e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e^{r2} \right) \\
&= \eta^{22} \left[e_r^2 \left(\partial_{\theta} e_2^r + \Gamma_{\theta\theta}^r e_2^{\theta} \right) + e_{\theta}^2 \left(\partial_{\theta} e_2^{\theta} + \Gamma_{\theta r}^{\theta} e_2^r \right) \right].
\end{aligned} \tag{A.42}$$

Substituindo as expressões dos vierbeins e das conexões:

$$\begin{aligned}
\omega_{\theta}^{22} &= \left[(1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \sin \theta \left((1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \cos \theta - \frac{\cos \theta}{(1 + \alpha f(r))} \right) \right. \\
&\quad \left. + r \cos \theta \left(-\frac{\sin \theta}{r} + \frac{1}{r} (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta \right) \right] \\
&= \left[\sin \theta \cos \theta - (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta - \sin \theta \cos \theta + (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta \right] = 0
\end{aligned} \tag{A.43}$$

Cálculo da conexão de spin $\omega_{\theta}^{12} = -\omega_{\theta}^{21}$

Neste ponto, determinamos a componente não nula da conexão de spin ω_μ^{ab} , necessária para a construção do operador de Dirac em uma variedade curva. A seguir, realizamos explicitamente o cálculo da componente ω_θ^{12} a partir da definição geral:

$$\begin{aligned}\omega_\theta^{12} &= e_\nu^1 \left(\partial_\theta e^{\nu 2} + \Gamma_{\theta\lambda}^\nu e^{\lambda 2} \right) = e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta r}^r e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_\theta^1 \left(\partial_\theta e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^\theta e^{\theta 2} \right) \\ &= e_r^1 \left(\partial_\theta e^{r2} + \Gamma_{\theta\theta}^r e^{\theta 2} \right) + e_\theta^1 \left(\partial_\theta e^{\theta 2} + \Gamma_{\theta r}^\theta e^{r2} \right) \\ &= \eta^{22} \left[e_r^1 \left(\partial_\theta e_2^r + \Gamma_{\theta\theta}^r e_2^\theta \right) + e_\theta^1 \left(\partial_\theta e_2^\theta + \Gamma_{\theta r}^\theta e_2^r \right) \right].\end{aligned}\tag{A.44}$$

Substituindo agora as expressões explícitas dos vierbeins e das conexões de Christoffel, obtemos:

$$\begin{aligned}\omega_\theta^{12} &= \left[(1 + \alpha f(r))^{\frac{1}{2}} \cos \theta \left((1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \cos \theta - \frac{r}{(1 + \alpha f(r))} \cdot \frac{\cos \theta}{r} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \sin \theta \left(-\frac{\sin \theta}{r} + \frac{1}{r} (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin \theta \right) \right] \\ &= \left[\cos^2 \theta - (1 + \alpha f(r))^{-1} \cos^2 \theta + \sin^2 \theta - (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \right] \\ &= \left[1 - (1 + \alpha f(r))^{-1} \cos^2 \theta - (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \right] \\ &= \left[1 - (1 + \alpha f(r))^{-1} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \right].\end{aligned}\tag{A.45}$$

Portanto, temos que a única componente não nula da conexão de spin é dada por:

$$\omega_\theta^{12} = \left[1 - (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \right],\tag{A.46}$$

e, usando a antissimetria da conexão de spin no espaço interno, temos também:

$$\omega_\theta^{21} = - \left[1 - (1 + \alpha f(r))^{-\frac{1}{2}} \right].\tag{A.47}$$

Com isso, obtemos a forma explícita do termo da conexão de spin Ω_θ , que será incorporado ao Hamiltoniano de Dirac em coordenadas curvilíneas:

$$\Omega_\theta = \frac{1}{2} \omega_\theta^{12} \gamma_1 \gamma_2 = \frac{1 - (1 + \alpha f(r))^{-1/2}}{2} \gamma_1 \gamma_2.\tag{A.48}$$

Um ponto notável nesse resultado é que, apesar do cálculo envolver derivadas parciais em relação a θ , o resultado final da conexão de spin ω_θ^{12} depende apenas da coordenada radial r . Essa independência angular decorre da simetria axial da métrica da superfície adotada. Isso significa que o campo de conexão de spin Ω_μ é azimutalmente simétrico, o que implica, por exemplo, que os efeitos geométricos sobre os férmions dependerão apenas da distância radial à origem da curvatura, e não de sua direção.

APÊNDICE C – ÁLGEBRA DE CLIFFORD

A álgebra de Clifford é definida como o conjunto de matrizes γ_μ que satisfazem a seguinte relação de anticomutação:

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2g_{\mu\nu} I, \quad (\text{B.1})$$

onde $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico do espaço-tempo considerado e I é a matriz identidade[89]. No caso de interesse, lidamos com uma métrica do tipo $\text{diag}(1, -1, -1)$, correspondente a um espaço-tempo (2+1)-dimensional com assinatura $(+, -, -)$.

Matrizes de Pauli

Para o estudo de férmions sem massa em grafeno, que efetivamente se comportam como partículas relativísticas em duas dimensões espaciais mais o tempo, podemos empregar uma representação mínima das matrizes γ_μ , utilizando matrizes de Pauli σ_i . A representação adotada neste trabalho é:

$$\gamma_0 = \sigma_3, \quad \gamma_1 = i\sigma_2, \quad \gamma_2 = -i\sigma_1. \quad (\text{B.2})$$

As matrizes de Pauli σ_i são um conjunto de matrizes hermitianas e unitárias fundamentais na descrição do spin em mecânica quântica, e são dadas explicitamente por:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Essas matrizes obedecem a duas importantes relações algébricas. A primeira é a *álgebra de Lie* do grupo $SU(2)$, dada pelo comutador:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (\text{B.4})$$

e a segunda é a relação de anticomutação:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I, \quad (\text{B.5})$$

onde ϵ_{ijk} é o símbolo de Levi-Civita, totalmente antissimétrico, e δ_{ij} é o delta de Kronecker. Essas propriedades são fundamentais para a verificação da álgebra de Clifford e estão amplamente discutidas em referências clássicas sobre álgebra de Lie e teoria de grupos, como [90–93].

Representação das matrizes γ

Vamos verificar que a representação escolhida para as matrizes γ_a satisfaz de fato a álgebra de Clifford com a métrica $\eta_{ab} = \text{diag}(1, -1, -1)$. Para isso, calcularemos os anticomutadores $\{\gamma_a, \gamma_b\}$ utilizando as propriedades algébricas das matrizes de Pauli.

- **Termos diagonais:**

$$\{\gamma_0, \gamma_0\} = \sigma_3^2 + \sigma_3^2 = 2\sigma_3^2 = 2I \Rightarrow 2g_{00} = 2,$$

$$\{\gamma_1, \gamma_1\} = (i\sigma_2)^2 + (i\sigma_2)^2 = 2(i)^2\sigma_2^2 = -2I \Rightarrow 2g_{11} = -2,$$

$$\{\gamma_2, \gamma_2\} = (-i\sigma_1)^2 + (-i\sigma_1)^2 = 2(-i)^2\sigma_1^2 = -2I \Rightarrow 2g_{22} = -2.$$

- **Termos cruzados:**

$$\{\gamma_0, \gamma_1\} = \sigma_3(i\sigma_2) + (i\sigma_2)\sigma_3 = i(\sigma_3\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3),$$

$$= i(\{\sigma_3, \sigma_2\}) = i(0) = 0,$$

$$\{\gamma_0, \gamma_2\} = \sigma_3(-i\sigma_1) + (-i\sigma_1)\sigma_3 = -i(\sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_3),$$

$$= -i(\{\sigma_3, \sigma_1\}) = -i(0) = 0,$$

$$\{\gamma_1, \gamma_2\} = (i\sigma_2)(-i\sigma_1) + (-i\sigma_1)(i\sigma_2) = -i^2(\sigma_2\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2) = \sigma_2\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2,$$

$$= \{\sigma_2, \sigma_1\} = 0.$$

Portanto, todos os anticomutadores entre matrizes diferentes se anulam, enquanto os anticomutadores diagonais reproduzem corretamente os elementos da métrica:

$$\{\gamma_a, \gamma_b\} = 2\eta_{ab}I.$$

Concluimos, assim, que a representação escolhida satisfaz rigorosamente a álgebra de Clifford no espaço (2+1)-dimensional com a assinatura $(+, -, -)$. Essa verificação justifica plenamente o uso das matrizes γ_μ adotadas neste trabalho para a descrição de férmions de Dirac sem massa em superfícies planas ou curvas de grafeno.