

UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAS

JORGE MAURÍCIO SILVA SANTOS

Efeito da Distorção e de Defeitos Topológicos nos níveis de Energia de Anéis Quânticos

> Juazeiro-BA 2015



COLEGIADO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAS - CPGCM – UNIVASF

JORGE MAURÍCIO SILVA SANTOS

Efeito da Distorção e de Defeitos Topológicos nos níveis de Energia de Anéis Quânticos

Trabalho apresentado a Universidade Federal do Vale do São Francisco – UNIVASF, campus Juazeiro, como requisito para obtenção do título de mestre em ciência dos materiais.

Orientador: Prof. Dr. Aníbal Livramento da Silva Netto

Juazeiro-BA

2015

CIÉNCIA MATERIAIS

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO Avenida Antônio Carlos Magalhães, 510 - Santo Antônio. CEP: 48902-300 Juazeiro/BA Tel/Fax: (74)3614-1932, <u>www.univasf.edu.br/~cpgcm</u> COLEGIADO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Mestrando: Jorge Maurício Silva Santos

Título da dissertação

Efeito da distorção e de defeitos topológicos nos níveis de energia de anéis quânticos.

A banca examinadora, composta pelos professores Aníbal Livramento da Silva Netto (Presidente e Orientador), Márcio Pazetti da Universidade Federal do Vale do São Francisco e Caio Veloso Sátiro da UFRPE, consideram o candidato:

(×) Aprovado

()Reprovado

Secretaria do Colegiado de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais da Universidade Federal do Vale do São Francisco ao sexto dia do mês de fevereiro de 2015.

Prof. Aníbal L. da Silva Netto

Prof. Márcio Pazetti

Prof. Caio Veloso Sátiro

	Santos, Jorge M. S.
S586e	Efeito da Distorção e de Defeitos Topológicos nos Níveis de Energia de Anéis Quânticos / Jorge Maurício Silva Santos. – Juazeiro-BA, 2015.
	ix, 64 f.: il. 29 cm.
	Dissertação de Mestrado (Mestrado em Ciência dos Materiais) apresentada a Universidade Federal do Vale do São Francisco, Campus Juazeiro, 2015.
	Orientador (a): Prof. Dr. Aníbal Livramento da Silva Netto. Referências.
	1. Anéis Quânticos. 2. Defeitos Topológicos. 3. Níveis de Energia. I. Título. II Silva Netto, Aníbal Livramento da Universidade Federal do Vale do São Francisco.
	CDD 621.31

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Integrado de Biblioteca SIBI/UNIVASF

Dedico este trabalho ao meu pai José Jorge e a minha avó Ana Alzira (*in memorian*).

Agradecimentos

À minha "mãe avó", Ana Alzira.

Aos meus pais, José Jorge e Sônia Cerqueira.

Aos meus irmãos, Josiane, Jocimara, Jorge Fabrício, Cleide Jane, Jorge André, Cássia Raquel, Rute, Tiago.

À minha namorada, Itamilla Rocha.

Aos professores, Aníbal Livramento, Marcio Pazetti, Caio Sátiro e Felipe Wergete.

À todos meus amigos.

"Eu, um universo de átomos, um átomo no universo".

Richard Feynman

Resumo

Os anéis quânticos têm atraído o interesse dos pesquisadores devido à possibilidade de investigar fenômenos de interferência quântica. Dentre vários fenômenos podemos destacar; o efeito Aharonov-Bohm e o efeito Hall. Estes efeitos podem ser analisados em sistemas nanoestruturados como anéis quânticos ou até mesmo em nanotubos de carbono. Tais sistemas permite a construção de aparelhos mais eficientes devido as suas alterações nas propriedades quando possuem algum tipo de defeito na sua estrutura. Neste trabalho, buscamos entender como as propriedades físicas em sistemas mesoscópicos bidimensionais são influenciadas pela geometria, visando examinar estruturas na presença de defeitos topológicos. Procuramos investigar a dinâmica quântica de uma partícula se movendo em uma superfície cilíndrica e em uma superfície cilíndrica distorcida na presença de uma desclinação. Para isso fizemos uma conexão entre dois formalismos ligeiramente diferentes. Partimos inicialmente da escolha conveniente de um sistema de coordenadas curvilíneas generalizada para descrever a superfície de um sistema quântico bidimensional. Posteriormente, através da Equação de Schrödinger, encontramos uma expressão matemática para o espectro de energia e para o potencial geométrico constante de confinamento da partícula na superfície de um anel quântico distorcido. Além disso, discutimos a influência do defeito topológico (desclinação) nos níveis de energia.

Palavras-Chave: Anéis quânticos, defeito topológico, níveis de energia.

Abstract

Quantum rings have attracted the interest of researchers due to the possibility of investigating quantum interference phenomena. Among various phenomena can be highlighted; the Aharonov-Bohm and Hall effects. These effects can be examined in systems as nanostructured quantum rings or even carbon nanotubes. Such systems allow the construction of more efficient appliances due its changes in properties when they have some sort of defect in its structure. In this work, we seek to understand how the physical properties in two-dimensional mesoscopic systems are influenced by the geometry, aiming to examine structures in the presence of topological defects. We seek to investigate the dynamics of a quantum particle be moving in a cylindrical surface and a cylindrical surface distorted in the presence of a desclinação. To do this we made a connection between two slightly different formalities. We started choosing conveniently a generalized curvilinear coordinate system to describe the surface of a two-dimensional quantum system. Later, through the Schrödinger equation, we find a mathematical expression for the energy spectrum and the constant geometric potential of particle confinement in the surface of a distorted quantum ring. In addition, we discussed the influence of topological defects (disclination) at the energy levels.

Keywords: Quantum rings, topological defect, energy levels.

Lista de Figuras

1. Algumas estruturas e suas respectivas dimensões p.9		
1.1 Defeito Topológico (disclinação) obtido através do processo de		
Volterra p.12		
1.2. Defeito Topológico (discordância); A discordância é formada ao longo da		
direção perpendicular ao plano e associada ao vetor de Burgers de		
módulo <i>b</i> p.13		
1.3. Processo de Volterrap.13		
1.4. Representação de uma partícula se movendo se movendo em um anel		
quântico unidimensionalp.16		
2.1. Sistema de coordenadas curvilíneasp.17		
2.2. Anel Quântico Distorcidop.26		
3.1. Partícula se movendo em uma superfície arbitrária distorcidap.33		

Sumário

Capitulo 19
NANOTECNOLOGIA E SUAS APLICAÇÕES9
1.1 Defeitos Topológicos12
1.2 Sistemas Mesoscópicos15
Capitulo 217
EFEITO DA DISTORÇÃO EM ANÉIS QUÂNTICOS17
2.1 Partícula limitada a uma superfície qualquer17
2.2 Partícula limitada a uma curva fechada26
Capitulo 333
EFEITO DA DISTORÇÃO E DA TOPOLOGIA EM ANÉIS QUÂNTICOS
3.1 Dinâmica quântica da partícula em uma superfície cilíndrica
3.2 Dinâmica quântica da partícula em uma superfície cilíndrica distorcida na
presença de uma desclinação48
Capitulo 457
CONSIDERAÇÕES FINAIS
Apêndice A58
Apêndice B59
Referências Bibliográficas60

Capitulo 1

NANOTECNOLOGIA E SUAS APLICAÇÕES

Podemos dizer que a nanotecnologia é o ramo da ciência que estuda o comportamento das partículas muito pequenas com dimensões da ordem de nanômetros em um meio material manipulável, voltadas para aplicação na tecnologia. Para termos uma ideia sobre as dimensões envolvidas, um nanômetro equivale a um milímetro dividido em um milhão de partes. Um fio de cabelo, por exemplo, possui uma espessura média de 75.000 nanômetros.



Figura 1:Algumas estruturas e suas respectivas dimensões Fonte: Disponível em https://s3-sa-east-1.amazonaws.com/ofitexto.arquivos/imagens/216_2.gif

A Figura 1 ilustra pequenas estruturas relacionadas ao seu tamanho cujas dimensões estão na faixa de 0,1 a 100 nanômetros.

Quando nos referimos aos métodos experimentais de preparação de nanoestruturas, podemos destacar duas metodologias: bottom up (de baixo para cima) e top down (de cima para baixo). A abordagem (bottom-up) consiste em construir estruturas átomo a átomo, ou molécula por molécula; a primeira etapa é fabricar os blocos (tijolos) da matéria de forma precisa, controlada e

reprodutível (Yamamoto, Ohnuma *et al.*, 2012). De acordo com a perspectiva Top-Down parte-se de um bloco sólido para as nanoestruturas, do "macro para o nano". Para citar um exemplo a trituração, é um método tipicamente top-down que proporciona a obtenção de nanopartículas. Porém, as estruturas obtidas geralmente possuem superfícies com consideráveis imperfeições. Além disso, vale ressaltar que métodos avançados de síntese e, também, métodos para observar e medir o comportamento de certas propriedades físicas (mecânicas, elétricas, magnéticas, entre outras) vem sendo desenvolvidos (Yamamoto, Ohnuma *et al.*, 2013).

Outra forma de fabricação consiste em submeter um corpo sólido à ação de corrosão seletiva através de técnicas de litografia ou engenharia de precisão. Este é o caso do processo de fabricação de semicondutores (Guo, Krauss *et al.*, 1997).

O estudo da nanotecnologia possui uma grande vantagem, no que se refere ao aumento da área superficial dos materiais produzidos, implicando na obtenção de materiais muito mais reativos. Como consequência, as nanoestruturas obtidas absorvem calor facilmente e a temperatura de fusão diminui no caso de sólidos. Este é apenas um, dentre vários exemplos de como os nanomateriais diferem de certos materiais com dimensões macroscópicas.

Um dos materiais de grande interesse tanto para a Nanociência quanto para a Nanotecnologia é o grafeno. O grafeno nada mais é do que uma das inúmeras camadas que compõem a grafite. Um cristal de grafite com 1 mm de espessura consiste três milhões camadas de de de grafeno sobrepostas (empilhadas), unidas por interações intermoleculares. Dentre outras propriedades do grafeno, podemos listar as seguintes: é um condutor transparente, é flexível e mecanicamente resistente. Eis algumas de suas aplicações tecnológicas: fabricação de telas ultra-finas, flexíveis e sensível ao toque, nanofiltragem etc.

Uma das possíveis aplicações de nanoestruturas é na computação quântica. A construção dos chamados computadores quânticos depende do uso de

estruturas que se comportem ou que possam ser modeladas como um sistema de dois níveis. A partir desse sistema de dois níveis, podemos obter os chamados bits quânticos (ou qubits, espécie de abreviação para o termo em inglês quantum bits), os quais apresentam certas vantagens em relação aos bits clássicos, por exemplo, em relação à criptografia (Nielsen, 2010). Podemos definir um computador quântico como sendo, um dispositivo que utiliza os princípios da mecânica quântica para processar informação. O "paralelismo quântico" é considerado como a principal vantagem de um computador quântico. Este é fundamentado em uma das propriedades mais intrigante da Mecânica Quântica, a superposição lógica de estados distintos. Ao invés de um ou outro, como na Lógica Digital, um bit quântico abre a possibilidade de se obter ambos os dígitos, ou seja, representar 1 e 0 ao mesmo tempo. Os qubits podem existir como uma combinação de todos os números de dois bits possíveis quando se tem dois qubits, ou seja, podem existir simultaneamente. Generalizando, uma coleção de gubits poderia representar um empilhado de números ao mesmo tempo, assim um computador quântico poderia processar dados simultâneos (Melo, 2003).

Algumas das características do computador quântico são:

 Armazenamento. Os qubits precisam ser armazenados por períodos de tempo suficientes para completar computações interessantes.

 Isolamento. Os qubits precisam estar isolados do ambiente, para minimizar erros por decoerência.

• Leitura. Os qubits precisam permitir sua leitura de forma eficiente e confiável.

Para que as propriedades de materiais como esses se modifiquem é conveniente, na maioria das vezes, introduzir um tipo de defeito topológico e observar como a geometria influencia nas propriedades físicas.

1.1 Defeitos Topológicos

Defeitos em cristais podem ser considerados como uma imperfeição ou qualquer irregularidade na estrutura de sua rede periódica de átomos. Essas irregularidades são classificadas de acordo com as suas dimensões em lineares, planares, pontuais, etc. Defeitos em linha, falhas de empilhamento e regiões amorfas em um cristal são exemplos de defeitos em cristais também conhecido como defeitos cristalinos (Callister, 2002).

Sabe-se que certos sistemas quânticos na presença de defeitos topológicos têm suas propriedades físicas alteradas (Netto, Chesman *et al.*, 2008). A descrição de alguns desses sistemas com defeitos topológicos pode ser feita a partir da chamada Teoria Geométrica dos Defeitos (TGD) em sólidos. Neste formalismo os defeitos em meios elásticos são descritos por uma métrica não-Euclidiana (Kamien, 2002). No limite do continuo, a curvatura e a torção podem ser associadas as "discordâncias" e as "desclinações". A discordância está associada à torção através do chamado vetor de Burgers, ao passo que a desclinação está associada à curvatura através do denominado ângulo de Frank (Furtado, Bezerra *et al.*, 2001). Existem trabalhos na literatura que investigam a influência do defeito topológico nas propriedades físicas de um sistema mesoscópico bidimensional (Furtado e Moraes, 1999), (Marques, Furtado *et al.*, 2001). O espectro de energia, a magnetização e as correntes persistentes são algumas das propriedades físicas que são afetadas pela presença de um defeito topológico (Netto, 2006).

As figuras 1.1 e 1.2 abaixo representam dois tipos de defeitos topológicos, desclinação e discordância



Figura 1.1: Defeito Topológico (desclinação) obtido através do processo de Volterra (Moraes, 2000)



Figura 1.2: Defeito Topológico (discordância); A discordância é formada ao longo da direção perpendicular ao plano e associada ao vetor de Burgers de módulo b (Moraes, 2000)

A métrica que descreve o espaço na presença de uma desclinação em coordenadas cilíndricas é (Moraes, 2000)

$$ds^{2} = dz^{2} + dr^{2} + \alpha^{2}r^{2}d\theta^{2} \qquad (1.1)$$

onde r é a coordenada radial, θ a coordenada angular e z a coordenada ao longo do plano definido (r, θ) .

A metodologia para gerar uma desclinação é conhecida como processo de Volterra (Puntigam e Soleng, 1997) (recorta e cola). Isto corresponde a extrair ou inserir um ângulo diedral (Ângulo formado entre dois semiplanos de mesma origem, não contidos num mesmo plano). O ângulo formado pela figura 1.3 na terceira etapa abaixo é definido como



$$\gamma = 2\pi (1 - \alpha') \tag{1.2}$$

onde $\alpha < 1$ admite valores entre $0 > \alpha > 1$. Esta medida angular também é conhecida como Ângulo de Frank (Kamien, 2002).

Já para o defeito linear do tipo discordância representado na figura 1.2, teremos a métrica descrita da seguinte forma (Moraes, 2000)

$$ds^{2} = (dz + \frac{b}{2\pi}d\theta)^{2} + dr^{2} + r^{2}d\theta^{2}$$
(1.3)

onde o deslocamento entre os bordos do corte dirigido ao longo do eixo z é o chamado vetor de Burgers de módulo b. Este defeito é também conhecido como discordância em hélice (Puntigam e Soleng, 1997; Moraes, 2000).

1.2 Sistemas Mesoscópicos

Um dos principais objetivos da pesquisa na área de Física da Matéria Condensada é desenvolver materiais cuja estrutura deve ser definida com precisão, em nível atômico, para dotá-los de propriedades e comportamentos específicos para determinadas aplicações. Essa tarefa depende cada vez mais e mais da atuação conjunta de técnicas sofisticadas que vão da preparação e da caracterização ao entendimento teórico desses novos materiais. Neste capítulo, abordaremos um modelo que permite descrever alguns tipos de nanoestruturas, a saber, pontos quânticos, antidots, fios e anéis quânticos.

Sistemas quânticos que têm dimensões maiores que a escala atômica e dimensões menores a objetos macroscópicos, também pode ser chamados de sistemas mesoscópicos (Netto, 2006). Sistemas como este têm despertado o interesse dos cientistas devido a uma extensa gama de aplicações. A seguir citamos alguns dos principais exemplos de sistemas mesoscópicos.

Anéis Quânticos são nanoestruturas bidimensionais caracterizadas pelo confinamento de partículas (elétrons), de modo que, o movimento dos portadores de carga seja em uma superfície cujo caminho seja uma circunferência (Longhi, 2013). Sistemas como este são utilizados para estudo de fenômenos de interferência quântica em propriedades de transporte (Joibari, Blanter *et al.*, 2013). A propósito, não são novidade as investigações acerca do comportamento ante ao fenômeno de interferência em anéis quânticos metálicos e semicondutores (Levy, Dolan *et al.*, 1990).

Pontos quânticos são caracterizados pelo confinamento de partículas (elétrons) nas três dimensões espaciais. Tais sistemas nos possibilitam desenvolver diversos dispositivos eletrônicos, bem como aumentar sua eficiência. Existem varias técnicas de fabricação de pontos quânticos. Uma delas é o método de crescimento pelo modo de Stranski-Krastanov (SK) que consiste na formação de uma ou duas monocamadas atômicas com crescimento em duas dimensões (Kohmoto, Nakamura *et al.*, 1999). Essa técnica produz pontos quânticos com

15

ótima eficiência óptica e a partir desta foi possível construir dispositivos optoeletrônicos, células fotovoltaicas, lasers de semicondutores, detectores etc. Cabe destacar um fato interessante: a fluorescência em pontos quânticos depende mais das dimensões dos pontos do que do material que este é feito (Gallardo, Martinez *et al.*, 2010). Devido ao confinamento, vale acrescentar ainda que os pontos quânticos possuem um espectro de energia discreto, o que implica em energias bem definidas para o sistema tratado.

Para desenvolver pontos, fios e anéis quânticos as partículas devem estar confinadas. Para isso, é necessário impor algumas condições de contorno para o sistema, em outras palavras, devemos ter um potencial de confinamento para que a partícula fique sujeita a um "aprisionamento" (Neto, 2011). A figura 1.4 mostra o movimento de uma partícula em uma "linha fechada" a qual denominamos de anel quântico. Este modelo é usado para a descrição de fenômenos qualitativos relacionados com a estrutura eletrônica de estados confinados em anéis. No próximo capítulo, será discutido um modelo teórico que descreve a dinâmica de uma partícula numa superfície arbitrária.



Figura 1.4: Representação de uma partícula se movendo em um anel quântico unidimensional (Neto, 2011)

Capitulo 2

EFEITO DA DISTORÇÃO EM ANÉIS QUÂNTICOS

2.1 Partícula limitada a uma superfície qualquer

Aqui abordaremos um formalismo para a dinâmica quântica da partícula em uma superfície imersa num espaço tridimensional, tendo por base seminal de R.C.T. da costa (Da Costa,1981). Para iniciar, é interessante fazer uma breve revisão da dinâmica quântica de uma partícula restrita a se mover em uma superfície qualquer. Para isso, consideramos uma partícula de massa m numa superfície S de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$,onde \vec{r} é o vetor posição de um ponto arbitrário da superfície. A região do espaço na vizinhança da superfície S pode também ser parametrizada. Assim teremos a seguinte equação paramétrica:

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \hat{N}(q_1, q_2)$$
(2.1)



Figura 2.1: Sistema de coordenadas curvilíneas (João Philipe, 2010)

A Figura 2.1 representa a superfície descrita pela equação (2.1), onde $\widehat{N}(q_1, q_2)$ é o vetor normal unitário à superfície *S* e \vec{R} o vetor que representa a distância entre a origem *o* e o ponto *Q*. O valor da coordenada q_3 para pontos onde a equação acima é não singular equivale à distância entre a superfície *S* e o ponto *Q* localizado no espaço de coordenadas (q_1, q_2, q_3).

A Geometria Diferencial nos permite relacionar o vetor posição com o tensor métrico g_{ij} e as coordenadas generalizadas (Struik, 1961). Sabe-se que

$$g_{ij} = \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}\right) \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}\right), \quad i, j = 1, 2$$
 (2.2)

е

$$h_{ij} = -\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \frac{\partial \hat{N}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2$$
(2.3)

são, respectivamente, as componentes do tensor métrico da primeira forma fundamental e os coeficientes da segunda forma fundamental desta superfície. Sabe-se que $g = det(g_{ij})$ e que $h_{ij} = h_{ji}$.

Por sua vez, o plano tangente a uma superfície descrita sob as condições apresentadas possui derivadas do vetor normal igual a

$$\frac{\partial \widehat{N}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^{2} \alpha_{ij} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}$$
(2.4)

com α_{ij} representando as componentes da matriz quadrada, que podem ser escritos como função da primeira e da segunda forma fundamental através das equações de Weingarten (Struik, 1961), onde

$$\alpha_{11} = \frac{1}{g} (g_{12}h_{21} - g_{22}h_{11}) \quad , \tag{2.5a}$$

18

$$\alpha_{12} = \frac{1}{g} (h_{11}g_{21} - h_{21}g_{11}), \qquad (2.5b)$$

$$\alpha_{21} = \frac{1}{g} (h_{22}g_{12} - h_{12}g_{22}), \qquad (2.5c)$$

$$\alpha_{22} = \frac{1}{g} (h_{21}g_{12} - h_{22}g_{11})$$
(2.5*d*).

De (2.3), (2.4) e (2.5) podemos escrever a seguinte relação:

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j} \delta_{ij} + q_3 \frac{\partial \hat{N}}{\partial q_i}$$
(2.6)

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker em que $\delta_{ij} = 1$, se i = j e $\delta_{ij} = 0$, se $i \neq j$. E, por conseguinte podemos escrever

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 \left(\delta_{ij} + \alpha_{ij} q_3 \right) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j} , i, j = 1,2$$
(2.7)

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} = \hat{N}(q_1, q_2) \tag{2.8}$$

Na vizinhança de *S* as componentes do tensor métrico covariante são dadas por

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j} \qquad i, j = 1, 2, 3.$$
(2.9)

Este é o produto escalar usual em \mathbb{R}^3 . Podemos notar que $G_{33} = \|\widehat{N}(q_1, q_2)\|^2 = 1$, pois \widehat{N} é unitário.

Usando (2.7) e denotando a matriz transposta pelo subscrito superior T,ficamos com:

$$\sum_{l,k=1}^{2} \left(\delta_{il} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{l}} \delta_{jk} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{k}} + \alpha_{il} q_{3} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{l}} \delta_{jk} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{k}} + \delta_{il} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{l}} \delta_{jk} q_{3} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{k}} + q_{3}^{2} \delta_{il} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{l}} \delta_{jk} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_{k}} \right)$$

$$(2.10)$$

ou ainda,

$$G_{ij} = g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} q_3^2 \qquad i, j = 1,2$$
(2.11)

onde $G_{i3} = G_{3i} = 0$, i = 1,2; $G_{33} = 1$, i, j = 1,2

Abordaremos agora o tipo de confinamento que limita o movimento de uma partícula à superfície ora descrita. Consideremos o potencial $V = V_{\lambda}(q_3)$ que depende somente da coordenada espacial, onde λ é uma incerteza mínima, segundo a qual medimos o limite do potencial:

$$\lim_{\lambda \to \infty} V_{\lambda}(q_3) = \begin{cases} 0, \ q_3 = 0\\ \infty, q_3 \neq 0 \end{cases}$$
(2.12)

Podemos imaginar o potencial do tipo oscilador harmônico dado por $V_{\lambda}(q_3) = \frac{1}{2}m\lambda^2 q_3^2$, onde λ funciona como um parâmetro que indica o quão forte é o potencial $V_{\lambda}(q_3)$ (Dacosta, 1981). Por sua vez, e nestas condições, a equação de Schrödinger dependente do tempo, relacionada à dinâmica do sistema é dada por (Sakurai, 1994).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$
(2.13)

20

onde ∇^2 é o operador laplaciano, ψ a função de onda associada a partícula, ma massa da partícula, V a energia potencial no qual a partícula está submetida e ħ é a constante de Planck h dividida por 2π . Através dessa equação, podemos atingir o objetivo desejado. Antes de irmos para o desenvolvimento da equação, é importante destacar a seguinte relação,

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G)_{ij} \frac{\partial}{\partial q_j} \right)$$
(2.14)

Em que *G* é o determinante do tensor métrico, ou seja, $G = \det(G_{ij})$. Esta expressão é conhecida como operador laplaciano, ou simplesmente, laplaciano, escrito em coordenadas curvilíneas $(q_{1j}, q_{2j}, q_{3j}, ..., q_{nj}; q_{i1}, q_{i2}, q_{i3}, ..., q_{in})$. Substituindo a expressão acima na equação de Schrodinger (2.13) teremos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i,j=1}^n \frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G)_{ij}\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right) + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$
(2.15)

Neste trabalho, iremos nos restringir a um número finito, e igual a três, de coordenadas generalizadas. Levando em conta a energia potencial denotada na equação (2.12), a equação acima toma a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G)_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$
(2.16)

Ao substituir a relação (2.12) em (2.16), podemos dividir o laplaciano em duas partes:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}D(q_1, q_2, q_3)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3}\left(ln\sqrt{G}\right)\frac{\partial\psi}{\partial q_3}\right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (2.17)$$

A parte denotada por $D(q_1, q_2, q_3)$, na relação (2.17), representa o operador laplaciano que descreve a superfície em questão, dada pelos termos i, j = 1, 2e a segunda e terceira parcela é a parte normal à superfície definida pelos termos i = j = 3.

Neste momento, estamos interessados em encontrar uma função de onda da superfície, que dependa somente das variáveis $q_1 e q_2$. Por essa razão podemos introduzir uma nova função de onda *X*, tal que,

$$X(q_1, q_2, q_3) = X_t(q_1, q_2, t) X_n(q_3, t)$$
(2.18)

A relação acima separa a função em dois fatores, uma que depende somente das coordenadas (q_1, q_2) , que por sua vez, representa a superfície bidimensional, e outro que depende apenas da coordenada q_3 , que representa a coordenada ao longo da normal. Os subscritos t e n que aparecem na relação acima fazem menção a tangente e a normal, respectivamente. Ou seja, a situação aqui representada corresponde a uma superfície bidimensional imersa em uma superfície tridimensional. De forma mais geral, temos uma superfície de dimensão N imersa em uma superfície de dimensão N+1.

Continuando nossa descrição quântica do sistema, a probabilidade de encontrar a partícula numa determinada região de área dS, nas proximidades de (q_1, q_2) em um dado instante t da superfície, é escrita por

$$|X_t(q_1, q_2, t)|^2 dS (2.19)$$

Podemos, também, definir a probabilidade de encontrar a partícula entre $q_3 e q_3 + dq_3$ em um dado instante *t*, como sendo,

$$|X_n(q_3, t)|^2 dq_3 \tag{2.20}$$

Para obter a probabilidade dP de encontrar a partícula em um volume dV nas proximidades de (q_1, q_2, q_3) em um dado instante t faremos

$$dP = |\psi(q_1, q_2, q_3, t)|^2 dV$$
(2.21)

O elemento de volume dV escrito em termos das coordenadas (q_1, q_2, q_3) é dado pelo produto misto,

$$dV = \left[\left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_1} \times \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_2} \right) \cdot \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} \right] dq_1 dq_2 dq_3$$
(2.22)

Podemos ainda reescrever o elemento de volume substituindo as relações (2.8) e (2.9) em (2.22), Assim ficamos com

$$dV = f(q_1, q_2, q_3) dS dq_3 \quad , \tag{2.23}$$

onde dS é dado pelo produto vetorial e a função $f(q_1, q_2, q_3)$ é escrita como(Dacosta, 1981);

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + q_3 Tr(\alpha) + q_3^2 det(\alpha)$$
(2.24)

em que $Tr(\alpha)$ é o traço da matriz α_{ii} .

Ao substituir a equação (2.23) na equação (2.21) temos,

$$dP = |\psi(q_1, q_2, q_3, t)|^2 f(q_1, q_2, q_3) dS dq_3$$
(2.25)

Isso nos permite, através da relação dada em (2.18), fazer uma transformação do tipo

$$\psi(q_1, q_2, q_3, t) = \left[f(q_1, q_2, q_3)\right]^{-1/2} X(q_1, q_2, q_3)$$
(2.26)

Podemos, portanto, substituir a equação (2.18) na (2.17) o que nos leva a

$$\sqrt{f} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} D\left(\frac{X}{\sqrt{f}}\right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3}\right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \right\} X + V_\lambda(q_3) X$$

$$= i\hbar \frac{\partial X}{\partial t} \quad . \qquad (2.27)$$

A condição imposta pelo potencial dado na relação (2.12) nos mostra que, a função de onda nas proximidades de $q_3 = 0$ terá um valor infinitamente próximo de zero, porém considerável. Assim, fazendo $q_3 \rightarrow 0$ exceto em $V_{\lambda}(q_3)$ na equação (2.27), ficamos com

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{1}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q_{i}}\left(\sqrt{G}(G)_{ij}\frac{\partial X}{\partial q_{j}}\right) - \frac{\hbar^{2}}{2m}\left(\left[\frac{1}{2}Tr(\alpha_{ij})\right]^{2} - det(\alpha_{ij})\right)X$$
$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{3}^{2}} + V_{\lambda}(q_{3})X = i\hbar\frac{\partial X}{\partial t}$$
(2.28)

Como o segundo termo da expressão (2.28) depende somente dos coeficientes da equação de Weingarten (Struik, 1988), que define a superfície, cujas coordenadas são (q_1, q_2), podemos definir

$$V_{s}(q_{1},q_{2}) = -\frac{\hbar^{2}}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij}) \right]^{2} - det(\alpha_{ij}) \right)$$
(2.29)

como o potencial da superfície. Este potencial pode ser escrito como função da curvatura gaussiana e da curvatura média, denotados respectivamente, pelas letras $K \in M$, onde

$$K = k_1 k_2 = \frac{1}{g} det(h_{ij}) \qquad curvatura \ Gaussiana \qquad (2.30)$$

е

$$M = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \frac{1}{2g}(g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) \quad (curvatura\ m\acute{e}dia) \quad (2.31)$$

Sendo $k_1 \in k_2$ as curvaturas principais

~

Daí,

$$V_s(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m}(M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{8m}(k_1 - k_2)^2$$
(2.32)

Podemos agora fazer uso da relação (2.20) para separar a equação (2.30) em duas equações, ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G)_{ij} \frac{\partial X_t}{\partial q_j} \right) - V_s(q_1, q_2) X_t = i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t}$$
(2.33)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3)X_n = i\hbar\frac{\partial X_n}{\partial t}$$
(2.34)

As equações (2.33) e (2.34) descrevem o comportamento da partícula na superfície, porem a equação (2.34) é apenas uma equação unidimensional para uma partícula de massa m sujeita ao potencial, que é menos interessante aqui. Já a equação (2.33) descreve a dinâmica da partícula confinada à superfície, tornando-a mais interessante por implicar a possibilidade de se obter estados ligados na superfície como consequência apenas da variação da curvatura com a posição. (Braga, 2011).

2.2 Partícula limitada a uma curva fechada

Partiremos agora para a descrição do comportamento de uma partícula restrita a se mover numa curva fechada e distorcida sob a influência de um campo magnético uniforme. A abordagem feita aqui será ligeiramente diferente do formalismo proposto no artigo (Da Costa,1981), mas o resultado obtido terá as mesmas características. Com a finalidade de analisar algumas propriedades desse sistema, tal como, a influência da distorção no espectro de energia de um anel quântico, os pesquisadores, desenvolveram um modelo teórico no qual podemos identificar tais propriedades. A abordagem feita aqui tem por base o paradigma apresentado no artigo (Pershin e Piermarocchi, 2005).

Consideremos inicialmente um elétron em um movimento estacionário com massa efetiva μ restrito a se mover numa curva fechada no plano sob a influência de um potencial geométrico V_{γ} , onde γ representa a largura característica de V_{γ} como mostrado na figura abaixo



Figura 2.2: Anel Quântico Distorcido (Pershin e Piemarocchi, 2005)

A figura 2.2 mostra um anel quântico distorcido que consiste de um longo seguimento de raio r_1 e outros três seguimentos curtos de raio r_2 com $l = (2\beta + \alpha)r_2$ e $L = (2\pi - \varphi)r_1 + l$ representando os respectivos comprimentos de

arco que delimita cada região. A relação entre α , $\beta \in \varphi$ pode ser expressa da seguinte forma (Ver Apêndice **A**)

$$\alpha = 2 \arcsin\left[\frac{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)(r_1 - r_2)}{2r_2}\right], \qquad \beta = \frac{\varphi}{2} + \frac{\alpha}{2}$$
(2.35)

O valor mínimo de r_2 para um dado $r_1 \in \varphi$ é, portanto, (Ver Apêndice **B**)

$$r_2^{min} = \frac{sen(\varphi/2)r_1}{2 + sen(\varphi/2)}$$
(2.36)

Para determinar a dinâmica da partícula quando um campo magnético externo B é aplicado perpendicularmente ao anel, utilizamos a equação de Schrödinger independente do tempo dada por,

$$\frac{1}{2\mu} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + V_{\gamma} = E \psi$$
(2.37)

onde \hat{p} , $\vec{A} = \frac{1}{2}[B,r]$, e, c, e E são respectivamente, o operador momento associado à partícula, o potencial vetor, a carga elementar da partícula, a velocidade da luz e a energia total do sistema. Devido ao fato do sistema assumir um alto grau de simetria, podemos considerar constante o potencial vetor, ou seja, consideremos a transformação de calibre, tal que $Div(\vec{A}) = 0$ (L.D.Landau, 1977b). Assim reescrevemos a equação acima como

$$\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \nabla^2 - 2\frac{e}{c} \vec{A} \cdot \hat{p} + \left(\frac{e}{c}\right)^2 A^2 \right) \psi + V_{\gamma} = E\psi$$
(2.38)

Considerando um sistema de coordenadas ortonormais (s,q), com s o comprimento de arco e q a coordenada ao longo da normal n(s) a curva C, a equação paramétrica para um ponto nas vizinhanças de C pode ser descrita pela expressão

$$\vec{R}(s,q) = \vec{r}(s) + q\hat{n}(s)$$
 , (2.39)

onde $\vec{r}(s)$ é o vetor posição e função do comprimento de arco.

Admitindo que o potencial V_{γ} dependa somente da coordenada q, podemos considerar a seguinte condição de contorno:

$$V_{\gamma}(q) = \begin{cases} 0, |q| < \gamma \\ \infty, |q| \ge \gamma \end{cases}$$
(2.40)

Antes de voltarmos à equação (2.38), iremos definir o operador momento \hat{p} e o operador laplaciano ∇^2 , respectivamente por

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \qquad e \quad \nabla^2_{s,q} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial q} \frac{\partial}{\partial q}$$
(2.41)

com h = 1 - k(s)q representando o fator de escala para o sistema de coordenadas adotado e $k(s) = \frac{1}{r(s)}$, a curvatura total da curva C.

Retornando à equação (2.38) e substituindo a relação (2.41) ficamos com

$$\frac{1}{2m} \left[-\bar{\hbar}^2 \left(\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial q} \frac{\partial}{\partial q} \right) - 2 \frac{eA}{c} \frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e^2 A^2}{c^2} \right] \psi + V_{\gamma}(x) = E \psi \qquad (2.42)$$

Para resolvermos a equação acima, iremos fazer uma mudança de variável, cuja transformação é feita através de

$$X(s,q) = \frac{\psi}{\sqrt{h}} \tag{2.43}$$

A nova função de onda, escrita na relação acima, permite que a equação (2.42) possa ser resolvida utilizando o método de separação de variáveis (Machado, 2012). Faremos aqui, o mesmo procedimento feito no artigo (Shevchenko e Kolesnichenko, 2002). Neste artigo o autor considera uma pequena perturbação devido ao fato da partícula se encontrar nas proximidades do fio quântico. Considerando apenas o termo de ordem zero na expansão, podemos encontrar uma solução em que ψ_t dependa somente de *q* e ψ_l dependa somente de *s*. Calculam-se as derivadas parciais da expressão

$$\psi(s,q) = \psi_t(q)\psi_l(s) \tag{2.44}$$

e substitui-se na expressão (2.42). Assim, obtemos as seguintes equações

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_t}{\partial q^2} + V_{\gamma}\psi_t(q) = E_t\psi_t$$
(2.45)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_l}{\partial s^2} - u_0\psi_l(s) = E_l\psi_l \tag{2.46}$$

onde, $u_0 = \frac{\hbar^2 k^2(s)}{8m}$ é a energia potencial (potencial efetivo) que depende da curvatura de C.

A equação (2.45) depende somente da coordenada q e a equação (2.46) depende somente da coordenada s. A primeira equação descreve o

confinamento transversal do elétron no anel dependendo somente do potencial V_{γ} , já a segunda, descreve o movimento longitudinal do elétron no anel e independe do comportamento do potencial V_{γ} , mas depende de u_0 que é o potencial efetivo, que aparece devido a curvatura de C.

É interessante observar, que o potencial vetor não aparece explicitamente no hamiltoniano devido a transformação de calibre $Div(\vec{A}) = 0$,mas é inserido no cálculo através da condição de contorno do fluxo modificado.

$$\psi(L) = \psi(0)e^{i2\pi\left(\frac{\phi}{\phi_0}\right)} \quad , \quad \frac{\partial\psi(L)}{\partial s} = \frac{\partial\psi(0)}{\partial s}e^{i2\pi\left(\frac{\phi}{\phi_0}\right)} \tag{2.47}$$

É facil observar, que o termo mutiplicativo na relação (2.47) é um fator de fase. Este fator não altera as propriedades da função de onda (L.D.Landau, 1977a). Além disso, as funções de onda estão conectadas em $\psi_1(l) = \psi_2(l)$, $\frac{\partial \psi_1(l)}{\partial s} = \frac{\partial \psi_2(l)}{\partial s}$. Portanto, podemos dividir o sistema em dois segmentos: um na região 0 < s < l e outro na região l < s < L. Assim, a equação (2.46) pode ser reescrita, respectivamente como

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial s^2} - u_0 \psi_1 = E_l \psi_1 \qquad \text{para } 0 < s < l \tag{2.48}$$

е

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial s^2} = E_l\psi_2 \qquad \text{para } l < s < L \tag{2.49}$$

As equações (2.48) e (2.49) descrevem a dinâmica da partícula para uma dada região. Aqui é importante lembrar que $l = (2\beta + \alpha)r_2$ e $L = (2\pi - \varphi)r_1$

A solução geral das equações (2.48) e (2.49) são:

$$\psi_1 = b_1 e^{ik_1 s} + b_2 e^{-ik_1 s} \tag{2.50}$$

$$\psi_2 = c_1 e^{ik_2 s} + c_2 e^{-ik_2 s} \tag{2.51}$$

onde $k_1 = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E_l + u_0)}$, $k_2 = \sqrt{2m/\hbar^2 E_l}$ e b_1 , b_2 , $c_1 e c_2$ são constantes à determinar.

Agora, o nosso problema é obter a expressão para o espectro de energia, tal que as funções de onda satisfaçam às condições imposta em (2.48) e (2.49). Para tanto, como as funções de onda estão conectadas, é conveniente encontrar a equação transcendental (Szelag e Szopa, 2008). Para isso utilizase o método da matriz transferência (Pereyra e Castillo, 2002) e a partir daí, encontramos o espectro de energia, sendo expresso por

$$2\cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_{0}}\right) + \left[\frac{k_{1}}{k_{2}} + \frac{k_{2}}{k_{1}}\right] sen(k_{1}l)sen[k_{2}(L-l)] - 2\cos(k_{1}l)\cos[k_{2}(L-l)] = 0$$
(2.52)

para $E_l > 0$, e

$$2\cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right) + \left[\frac{k_1}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_1}\right] \operatorname{sen}(k_1 l) \operatorname{senh}[\kappa(L-l)] - 2\cos(k_1 l) \cosh[\kappa(L-l)] = 0$$
(2.53),

para
$$-U_0 < E_l < 0$$
, onde $\kappa = -ik_2 = \sqrt{(2m/\hbar^2)(-E_l)} \operatorname{com} \Phi_0 = \frac{hc}{e}$

A distorção no anel causa um notável efeito no espectro de energia do sistema. A razão $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ que aparece nas equações acima (2.52) e (2.53) o fluxo Aharonov (Aharonov e Bohm, 1959). Observando a Figura 2.2 podemos verificar que $L = (2\pi - \varphi)r_1 + l$ é o comprimento total da curva C, $l = (2\beta + \alpha)r_2$ é o comprimento total dos três segmentos e u_0 é o potencial efetivo constante que depende da curvatura de C. O potencial efetivo u_0 expresso na relação (2.48), também pode ser expresso em termos dos raios r_1 e r_2 como,

$$u_0 = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{1}{r_2^2} - \frac{1}{r_1^2} \right) \tag{2.54}$$

Os níveis de energia calculados em (2.52) e (2.53) para anéis distorcidos como uma função do fluxo magnético pode ser observado em um gráfico representativo no artigo de Pershin e Piermarocchi, 2005. Neste artigo, também é visto como os raios $r_1 e r_2$ influenciam na curva do espectro de energia em função do fluxo magnético. O gráfico traça a curva que expressa como a energia do sistema varia com o fluxo magnético para valores distintos da razão entre os raios $r_1 e r_2$.

EFEITO DA DISTORÇÃO E DA TOPOLOGIA EM ANÉIS QUÂNTICOS

3.1 Dinâmica quântica da partícula em uma superfície cilíndrica

Nesta seção, iremos investigar a dinâmica quântica de uma partícula movendose em uma superfície cilíndrica. Para isso consideramos inicialmente uma partícula restrita a se mover numa superfície qualquer, cujo sistema de coordenadas generalizadas (q_1, q_2, q_3) define o espaço, conforme a figura abaixo:



Figura 3.1: Partícula se movendo em uma superfície arbitrária.

O sistema de coordenadas foi escolhido de tal forma que:

 q_1 seja a coordenada normal à superfície.

- q_2 seja a coordenada ao longo da superfície sendo ortogonal a q_1 e q_3 .
- q_3 seja a coordenada paralela a geratriz da superfície.

A métrica que descreve o espaço ora descrito é dada por:

$$dl^{2} = dq_{1}^{2} + [1 + k(q_{2})q_{1}]^{2}dq_{2}^{2} + dq_{3}^{2}$$
(3.1)

onde $k(q_2)$, a curvatura lateral da superfície, é função apenas de q_2 .

Então, podemos escrever

$$h_1 = 1$$
, $h_2 = 1 + k(q_2)q_1 = h$, $h_3 = 1$ (3.2)

como os respectivos fatores de escala em coordenadas generalizadas (Boas, 2006).

Passemos à formalização da descrição acerca da dinâmica quântica de partículas neste tipo de sistemas. Para isso, consideremos um elétron com massa efetiva *m* confinado pela presença de um potencial $V(q_1)$ numa superfície qualquer **S**. Um campo magnético \vec{B} é aplicado perpendicularmente à direção do plano expandido pelos versores associados às coordenadas q_1 e q_2 paralelamente à q_3 .

Para tal sistema, a equação de Schrödinger independente do tempo tem a forma:

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \psi + V(q_1)\psi = E\psi$$
(3.3)

onde $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento do elétron, $\vec{A} = \frac{1}{2}[B,r]$ é o potencial vetor e $V(q_1)$ é o potencial geométrico de confinamento. Vale lembrar que a partir daqui utilizaremos, na descrição da dinâmica do sistema, a equação de Schrödinger independente do tempo, uma vez que estamos interessados em estados estacionários do sistema. Podemos ainda reescrever a equação (3.3) como

$$\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \nabla^2 - 2\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{c}} \vec{A} \cdot \hat{\mathrm{p}} + \frac{\mathrm{e}^2}{\mathrm{c}^2} \mathrm{A}^2 \right) \psi + \mathrm{V}(\mathrm{q}_1) \psi = \mathrm{E}\psi \tag{3.4}$$

A fim de facilitar os cálculos, faremos uma mudança de variável $\psi = \frac{X}{\sqrt{h}}$, tal que X seja função de (q_1, q_2, q_3) . Assim,

$$\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \nabla^2 - 2\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{c}} \mathrm{A} \cdot \hat{\mathrm{p}} + \frac{\mathrm{e}^2}{\mathrm{c}^2} \mathrm{A}^2 \right) \frac{X}{\sqrt{h}} + \mathrm{V}(\mathrm{q}_1) \frac{X}{\sqrt{h}} = \mathrm{E} \frac{X}{\sqrt{h}}$$
(3.5)

Resolvendo apenas o operador Laplaciano $\nabla^2\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)$ teremos

$$\nabla^2 \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) = \frac{1}{h} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_1} \left[h \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial q_2} \left[\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial q_3} \left[h \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) \right] \right\}$$
(3.6)

Para facilitar os cálculos, iremos dividir o Laplaciano em três partes: 1º Parte

$$\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_1} \left[h \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) \right] \tag{3.7 a}$$

$$\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) = \frac{\partial}{\partial q_1} \left(X h^{-\frac{1}{2}} \right) \tag{3.7 b},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_1} \left(X h^{-\frac{1}{2}} \right) = h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_1} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_1} X$$
(3.7 c),

$$\frac{\partial}{\partial q_1} \left[h \frac{\partial}{\partial q_1} \left(X h^{-\frac{1}{2}} \right) \right] = \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_1} \frac{\partial X}{\partial q_1} + h^{\frac{1}{2}} \frac{\partial^2 X}{\partial q_1^2} + \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{4} \left(\frac{\partial h}{\partial q_1} \right)^2 X - \frac{h^{-\frac{1}{2}}}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial q_1^2} X$$
$$- \frac{h^{-\frac{1}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_1} \frac{\partial X}{\partial q_1} \tag{3.7 d},$$

$$\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_1}\left[h\frac{\partial}{\partial q_1}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)\right] = \frac{h^{-\frac{1}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_1}\frac{\partial X}{\partial q_1} + h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^2 X}{\partial {q_1}^2} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_1}\right)^2 X - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial^2 h}{\partial {q_1}^2} X$$
$$-\frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_1}\frac{\partial X}{\partial q_1} \tag{3.7 e}.$$

2° Parte

$$\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_2}\left[\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_2}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)\right] \tag{3.8 a},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) = \frac{\partial}{\partial q_2} \left(X h^{-\frac{1}{2}} \right) \tag{3.8 b},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_2} \left(X h^{-\frac{1}{2}} \right) = h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_2} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_2} X$$
(3.8 c),

36

$$\frac{\partial}{\partial q_2} \left[\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{X}{\sqrt{h}} \right) \right] = -\frac{3h^{-\frac{5}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_2} \frac{\partial X}{\partial q_2} + h^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} + \frac{5h^{-\frac{7}{2}}}{4} \left(\frac{\partial h}{\partial q_2} \right)^2 X$$
$$-\frac{h^{-\frac{5}{2}}}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial q_2^2} X - \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_2} \frac{\partial X}{\partial q_2} \tag{3.8 d},$$

$$\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_2}\left[\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_2}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)\right] = -\frac{3h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_2}\frac{\partial X}{\partial q_2} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_2}\right)^2 X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^2 h}{\partial q_2^2} X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{h}{\partial q_2^2} X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{h}{\partial q_2^2} X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{h}{\partial q_2^2} X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{h}{\partial q_2^2} X -$$

3° Parte

De forma análoga a equação (3.7e) teremos

$$\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_3}\left[h\frac{\partial}{\partial q_3}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)\right] = \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_3}\frac{\partial X}{\partial q_3} + h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^2 X}{\partial {q_3}^2} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_3}\right)^2 X - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial^2 h}{\partial {q_3}^2} X$$
$$-\frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_3}\frac{\partial X}{\partial q_3} \tag{3.9}.$$

Logo, devido a (3.7e), (3.8e) e (3.9) a equação (3.6) fica

$$\nabla^{2}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right) = \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{1}}\frac{\partial X}{\partial q_{1}} + h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{1}^{2}} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{1}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{1}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{1}}\frac{\partial X}{\partial q_{1}} \\ -\frac{3h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\right)^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}h}{\partial q_{2}^{2}}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_{2}}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}H}{\partial q_{2}}X - \frac{h^{-\frac{1}{2}}}{2}\frac{\partial^{2}H}{\partial q_{2}}X -$$

$$+\frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_3}\frac{\partial X}{\partial q_3} + h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^2 X}{\partial q_3^2} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4}\left(\frac{\partial h}{\partial q_3}\right)^2 X - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial^2 h}{\partial q_3^2} X$$
$$-\frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2}\frac{\partial h}{\partial q_3}\frac{\partial X}{\partial q_3} \tag{3.10}$$

Mas, devemos também escrever o operador momento \hat{p} para este sistema de coordenadas cilíndricas como

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \tag{3.11 a},$$

$$\hat{p} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial q_2}, \frac{\partial}{\partial q_3} \right)$$
(3.11 b),

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial q_1}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right), \frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial q_2}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right), \frac{\partial}{\partial q_3}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right)\right)$$
(3.11 c),

$$\hat{p} = -i\hbar \left(h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_1} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_1} X, h^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_2} - \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_2} X, h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_3} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} \frac{\partial h}{\partial q_3} X \right)$$

$$(3.11 d)$$

De (3.2), podemos obter as seguintes relações;

$$\frac{\partial h}{\partial q_1} = k(q_2) \quad e \quad \frac{\partial^2 h}{\partial q_1^2} = 0 \quad (3.12 a),$$

$$\frac{\partial h}{\partial q_2} = \frac{\partial k}{\partial q_2} q_1 = k'(q_2)q_1 \qquad e \qquad \qquad \frac{\partial^2 h}{\partial q_2^2} = k''(q_2)q_1 \qquad (3.12 b),$$

$$\frac{\partial h}{\partial q_3} = 0 \qquad e \qquad \frac{\partial^2 h}{\partial q_3^2} = 0 \qquad (3.12 c).$$

Considerando as relações acima, escrevemos os operadores laplaciano e momento, respectivamente, por

$$\nabla^{2}\left(\frac{X}{\sqrt{h}}\right) = h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{1}^{2}} - 2h^{-\frac{7}{2}}k'(q_{2})q_{1}\frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{2}^{2}} + h^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial^{2}X}{\partial q_{3}^{2}} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4}[k(q_{2})]^{2}X - \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2}k''(q_{2})q_{1}X + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4}X[k'^{(q_{2})q_{1}}]^{2}X$$
(3.13)

е

$$\hat{p} = -i\hbar \left(h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_1} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} k(q_2) X, \quad h^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_2} - \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{2} k'(q_2) q_1 X, \quad h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_3} \right)$$
(3.14)

Substituindo as relações (3.13) e (3.14) na equação (3.5), e denotando o potencial vetor por $\vec{A} = (A_{q_1}, A_{q_2}, A_{q_3})$, teremos:

$$\frac{1}{2m} \Biggl\{ -\hbar^{2} \Biggl[h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial^{2} X}{\partial q_{1}^{2}} - 2h^{-\frac{7}{2}} k'(q_{2}) q_{1} \frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-\frac{5}{2}} \frac{\partial^{2} X}{\partial q_{2}^{2}} + h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial^{2} X}{\partial q_{3}^{2}} + \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{4} [k(q_{2})]^{2} X
- \frac{h^{-\frac{7}{2}}}{2} k''(q_{2}) q_{1} X + \frac{5h^{-\frac{9}{2}}}{4} [k'(q_{2}) q_{1}]^{2} X \Biggr]
+ 2 \frac{\mathrm{eih}}{\mathrm{c}} \Biggl[(A_{q_{1}}, A_{q_{2}}, A_{q_{3}}) \cdot \Biggl(h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_{1}} - \frac{h^{-\frac{3}{2}}}{2} k(q_{2}) X, \quad h^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_{2}}
- \frac{h^{-\frac{5}{2}}}{2} k'(q_{2}) q_{1} X, \quad h^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial X}{\partial q_{3}} \Biggr) \Biggr] + \frac{\mathrm{e}^{2}}{\mathrm{c}^{2}} \mathrm{A}^{2} \frac{X}{\sqrt{h}} \Biggr\} + \mathrm{V}(q_{1}) \frac{X}{\sqrt{h}}
= \mathrm{E} \frac{X}{\sqrt{h}}$$
(3.15).

Multiplicando a equação acima por \sqrt{h} teremos:

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^{2} \left[\frac{\partial^{2} X}{\partial q_{1}^{2}} - 2h^{-3} k'(q_{2}) q_{1} \frac{\partial X}{\partial q_{2}} + h^{-2} \frac{\partial^{2} X}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{\partial^{2} X}{\partial q_{3}^{2}} + \frac{h^{-2}}{4} [k(q_{2})]^{2} X \right. \\ \left. - \frac{h^{-3}}{2} k''(q_{2}) q_{1} X + \frac{5h^{-4}}{4} [k'(q_{2})q_{1}]^{2} X \right] \\ \left. + 2 \frac{\mathrm{eih}}{\mathrm{c}} \left[\left(A_{q_{1}}, A_{q_{2}}, A_{q_{3}} \right) \cdot \left(\frac{\partial X}{\partial q_{1}} - \frac{h^{-1}}{2} k(q_{2}) X, h^{-1} \frac{\partial X}{\partial q_{2}} \right) \right] \\ \left. - \frac{h^{-2}}{2} k'(q_{2}) q_{1} X, \frac{\partial X}{\partial q_{3}} \right] + \frac{\mathrm{e}^{2}}{\mathrm{c}^{2}} \mathrm{A}^{2} X \right\} + \mathrm{V}(q_{1}) X = \mathrm{E} X$$
(3.16)

É fácil verificar na equação acima (3.16) que

$$\frac{\partial X}{\partial q_2} \left(h^{-2} \frac{\partial X}{\partial q_2} \right) = h^{-2} \frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} - 2h^{-3} \frac{\partial h}{\partial q_2} \frac{\partial X}{\partial q_2} = h^{-2} \frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} - 2h^{-3} k'(q_2) q_1 \frac{\partial X}{\partial q_2} \quad (3.17)$$

Para resolvermos a equação (3.16), faremos a mudança de variável tal que,

$$X = \tilde{X}u \tag{3.18}$$

onde,

$$u = exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\int_{0}^{q_{1}}A_{q_{1}}(q_{1}',q_{2},q_{3})dq_{1}'\right]$$
(3.19)

Neste trabalho, iremos analisar a o movimento de uma partícula em uma superfície. Por isso, será tomada a seção transversal da figura 3.1, cujas coordenadas que definem tal superfície são $q_1 e q_2$. Assim, podemos tornar a coordenada q_3 sem efeito para o potencial vetor, o que implica em $A_{q_3} = 0$. Dessa forma, podemos reescrever a relação (3.19) por

$$u = exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\int_{0}^{q_{1}}A_{q_{1}}(q_{1}',q_{2})dq_{1}'\right]$$
(3.20)

Para encontrar a nova equação em termos de \tilde{X} , devemos calcular as derivadas de (3.18) e (3.19) em relação às coordenadas q_1 e q_2 . Derivando a equação (3.18), obtemos

$$\frac{\partial X}{\partial q_1} = \frac{\partial (\tilde{X}u)}{\partial q_1} = \tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_1} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_1}$$
(3.21 *a*),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_1^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_1^2} = \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_1} \left(u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_1} \right)$$
(3.21 *b*),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_1^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_1^2} = \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_1} \frac{\partial u}{\partial q_1} + \tilde{X} \frac{\partial^2 u}{\partial q_1^2} + \frac{\partial u}{\partial q_1} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_1} + u \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial q_1^2}$$
(3.21 c).

Analogamente, para as coordenadas q_2 e q_3 , temos

$$\frac{\partial X}{\partial q_2} = \frac{\partial (\tilde{X}u)}{\partial q_2} = \tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_2} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_2}$$
(3.22 *a*),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_2^2} = \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_2} \right)$$
(3.22 b),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_2^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_2^2} = \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_2} \frac{\partial u}{\partial q_2} + \tilde{X} \frac{\partial^2 u}{\partial q_2^2} + \frac{\partial u}{\partial q_2} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_2} + u \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial q_2^2}$$
(3.22 c).

е

$$\frac{\partial X}{\partial q_3} = \frac{\partial (\tilde{X}u)}{\partial q_3} = \tilde{X}\frac{\partial u}{\partial q_3} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_3}$$
(3.23 *a*),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_3^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_3^2} = \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_3} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_3} \right)$$
(3.23 b),

$$\frac{\partial^2 X}{\partial q_3^2} = \frac{\partial^2 (\tilde{X}u)}{\partial q_3^2} = \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_3} \frac{\partial u}{\partial q_3} + \tilde{X} \frac{\partial^2 u}{\partial q_3^2} + \frac{\partial u}{\partial q_3} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_3} + u \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial q_3^2} \quad (3.23 c).$$

Da equação (3.20), obtemos

$$\frac{\partial u}{\partial q_1} = i \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{hc}} A_{q_1}(q_1, q_2) \cdot u \tag{3.24 a}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial q_1^2} = i \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{hc}} \left[A_{q_1}(q_1, q_2) \frac{\partial u}{\partial q_1} + u \frac{\partial A_{q_1}(q_1, q_2)}{\partial q_1} \right]$$
(3.24 b),

$$\frac{\partial u}{\partial q_2} = u.i \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{hc}} \frac{\partial}{\partial q_2} \left[\int_{0}^{q_1} A_{q_1}(q_1', q_2) dq_1' \right]$$
(3.24 c),

$$\frac{\partial u}{\partial q_2} = u. i \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{hc}} \frac{\partial A_{q_1}(q_1', q_2)}{\partial q_2} \int_0^{q_1} dq_1' \qquad (3.24 \, d).$$

Para garantir que a partícula se movimente somente na superfície do anel, ou seja, ao longo da coordenada longitudinal q_2 , faremos na equação (3.2) $q_1 \rightarrow 0$, consequentemente, $h \rightarrow 1$. Isso nos permite escrever

$$\frac{\partial u}{\partial q_2} = 0 \tag{3.25 a},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial q_2^2} = 0 \tag{3.25 b}.$$

Assim, a equação escrita em (3.16) fica:

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^{2} \left[\frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} \frac{\partial u}{\partial q_{1}} + \tilde{X} \frac{\partial^{2} u}{\partial q_{1}^{2}} + \frac{\partial u}{\partial q_{1}} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} + u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{1}^{2}} + \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{2}} \frac{\partial u}{\partial q_{2}} + \tilde{X} \frac{\partial^{2} u}{\partial q_{2}^{2}} \right. \\
\left. + \frac{\partial u}{\partial q_{2}} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{2}} + u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{2}^{2}} + \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{3}} \frac{\partial u}{\partial q_{3}} + \tilde{X} \frac{\partial^{2} u}{\partial q_{3}^{2}} + \frac{\partial u}{\partial q_{3}} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{3}} + u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{3}^{2}^{2}} \\
\left. + \frac{1}{4} [k(q_{2})]^{2} X \right] \\
\left. + 2 \frac{ei\hbar}{c} \left[\left(A_{q_{1}}, A_{q_{2}} \right) \cdot \left(\tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_{1}} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} - \frac{1}{2} k(q_{2}) \tilde{X} u, \tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_{2}} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{2}} \right) \right] \\
\left. + \frac{e^{2}}{c^{2}} A^{2} \tilde{X} u \right\} + V(q_{1}) \tilde{X} u = E \tilde{X} u$$
(3.26 a)

ou ainda

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^{2} \left[u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{1}^{2}} + u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{2}^{2}} + u \frac{\partial^{2} \tilde{X}}{\partial q_{3}^{2}} + \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} \frac{\partial u}{\partial q_{1}} + \tilde{X} \frac{\partial^{2} u}{\partial q_{1}^{2}} + \frac{\partial u}{\partial q_{1}} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} \right. \\
\left. + \frac{1}{4} [k(q_{2})]^{2} \tilde{X} u \right] \\
\left. + 2 \frac{\mathrm{ei}\hbar}{\mathrm{c}} \left[\left(A_{q_{1}}, A_{q_{2}} \right) \cdot \left(\tilde{X} \frac{\partial u}{\partial q_{1}} + u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{1}} - \frac{1}{2} k(q_{2}) \tilde{X} u , u \frac{\partial \tilde{X}}{\partial q_{2}} \right) \right] \\
\left. + \frac{\mathrm{e}^{2}}{\mathrm{c}^{2}} \mathrm{A}^{2} \tilde{X} u \right\} + \mathrm{V}(q_{1}) \tilde{X} u = \mathrm{E} \tilde{X} u$$
(3.26 b).

Podemos separar a equação (3.26 *b*) em três. Para isso consideremos \tilde{X} como o produto das funções $\Omega(q_1)$, $\Gamma(q_2)$ e $W(q_3)$, ou seja

$$\tilde{X}(q_1, q_2, q_3) = \Omega(q_1) \Gamma(q_2) W(q_3)$$
(3.27)

Aqui Ω depende somente da coordenada q_1 , Γ depende da coordenada q_2 e W depende da coordenada q_3 . Calculando as derivadas primeira e segunda da relação (3.27) e logo após substituindo na equação (3.26 *b*), ficamos com as três equações diferenciais

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2W(q_3)}{dq_3^2} = E_3W(q_3)$$
(3.28)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Omega(q_1)}{dq_1^2} + V(q_1)\Omega(q_1) = E_t\Omega(q_1)$$
(3.29)

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}\Gamma(q_{2})}{dq_{2}^{2}} + i\frac{e\hbar}{mc}A_{q_{2}}\frac{d\Gamma(q_{2})}{dq_{2}} - \frac{1}{8m}\hbar^{2}[k(q_{2})]^{2}\Gamma(q_{2}) - i\frac{e\hbar}{2mc}\frac{\partial A_{q_{1}}}{\partial q_{1}}\Gamma(q_{2}) + i\frac{e\hbar}{2mc}A_{q_{1}}k(q_{2})\Gamma(q_{2}) + \frac{e^{2}}{2mc^{2}}A_{q_{2}}^{2}\Gamma(q_{2}) = E_{L}\Gamma(q_{2})$$
(3.30)

onde $E = E_t + E_L + E_3$ representa a energia total do sistema. Os subscritos *t*, *L* e 3 fazem alusão, respectivamente, as componentes tangencial, longitudinal e a componente perpendicular ao plano (q_1, q_2).

As equações (3.28) e (3.29) tem soluções análogas a de um oscilador harmônico clássico (L.D.Landau, 1977b). Aqui estamos interessados em determinar a solução da equação (3.30) que descreve o comportamento da particula ao longo da coordenada longitudinal. Então, para simplificar, faremos uma substituição da forma

$$\Gamma(q_2) = exp\left[i\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{hc}}\int_{0}^{q_2} A_{q_2}(q_2')dq_2'\right]\tilde{\Gamma}(q_2)$$
(3.31)

Esta substituição nos permite escrever a equação (3.30) como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\tilde{\Gamma}(q_2)}{dq_2^2} - \frac{1}{8m}\hbar^2[k(q_2)]^2\tilde{\Gamma}(q_2) - i\frac{e\hbar}{2mc}\frac{\partial A_{q_2}}{\partial q_2}\tilde{\Gamma}(q_2) - i\frac{e\hbar}{2mc}\frac{\partial A_{q_1}}{\partial q_1}\tilde{\Gamma}(q_2) + i\frac{e\hbar}{2mc}A_{q_1}k(q_2)\tilde{\Gamma}(q_2) = E_L\tilde{\Gamma}(q_2)$$
(3.32)

Utilizando o Gauge de Coulomb

$$Div(A) = 0$$
, (3.33)

podemos concluir que:

$$Div(A) = \frac{1}{h} \frac{\partial (hA_{q_1})}{\partial q_1} + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{A_{q_2}}{h}\right) + \frac{1}{h} \frac{\partial (hA_{q_3})}{\partial q_3} \approx$$
$$\frac{\partial A_{q_1}}{\partial q_1} + \frac{\partial A_{q_2}}{\partial q_2} + \frac{\partial A_{q_3}}{\partial q_3} - k(q_2)A_{q_1} = 0 \quad , \tag{3.34}$$

pois $h \rightarrow 1$

onde o termo $k(q_2)A_{q_1}$ que aparece na expressão acima é desprezível devido ao fato da partícula está na superfície do cilindro. Logo, a equação (3.32) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\tilde{\Gamma}(q_2)}{dq_2^2} - \frac{1}{8m}\hbar^2[k(q_2)]^2\tilde{\Gamma}(q_2) = E_L\tilde{\Gamma}(q_2)$$
(3.35)

Finalmente, encontramos a equação que descreve a dinâmica da partícula ao longo da coordenada generalizada q_2 . Definindo as coordenadas (q_1, q_2, q_3) para uma superfície cilíndrica, teremos:

$$q_1 = q, \tag{3.36a}$$

$$q_2 = s, \tag{3.36b}$$

$$q_3 = z, \tag{3.36c}$$

onde q_1 é a coordenada normal à superfície, q_2 é a coordenada ao longo da superfície sendo ortogonal a q_1 e q_3 (comprimento do arco *s*) e q_3 é a coordenada paralela à geratriz da superfície, perpendicular ao plano (q_1, q_2) .

Assim, reescrevemos a equação (3.35) como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\tilde{\Gamma}(s)}{ds^2} - \frac{1}{8m}\hbar^2[k(s)]^2\tilde{\Gamma}(s) = E_L\tilde{\Gamma}(s)$$
(3.37)

Esta equação possui a mesma forma que a equação (2.46), e, através desta equação, podemos descrever a dinâmica da partícula ao longo da coordenada longitudinal a superfície (comprimento do arco denotado pela letra s). Antes de resolvermos a equação acima, faremos, na próxima seção, uma breve descrição da curvatura total de uma superfície k(s) em termos de uma desclinação α' , e logo após, buscaremos uma expressão para o espectro de energia de um anel quântico distorcido na presença de uma desclinação.

3.2 Dinâmica quântica da partícula em uma superfície cilíndrica distorcida na presença de uma desclinação

Nesta seção, iremos investigar a dinâmica quântica de uma partícula movendose em uma superfície cilíndrica distorcida na presença de um defeito topológico do tipo desclinação (Puntigam e Soleng, 1997). Contudo, iniciamos este procedimento com a determinação da curvatura em função da desclinação. A Curvatura Gaussiana e a Curvatura Média (Boas, 2006) de uma superfície bidimensional embutida no espaço são definidas, respectivamente, por

$$K = \det(g) = k_1 k_2 \tag{3.38}$$

е

$$M = \frac{1}{2}tr(g) = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$$
(3.39)

com

$$g = \begin{pmatrix} k_1 & 0\\ 0 & k_2 \end{pmatrix} \tag{3.40}$$

onde $k_1 \in k_2$ são as curvaturas principais.

A curvatura total é dada pela diferença

$$H^2 - K \tag{3.41}$$

Para a superfície cônica em questão, temos as expressões para a curvatura gaussiana e a curvatura média da superfície como (Filgueiras e Moraes, 2008),

$$K = \left(\frac{1-\alpha'}{\alpha'}\right)\frac{\delta(r)}{r} \tag{3.42}$$

$$H = \frac{\sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{2\alpha' r} \tag{3.43}$$

com $\alpha' \in (-1,1), \alpha' \neq 0$ representando a desclinação, *r* o raio de curvatura, e $\delta(r)$ a função Delta de Dirac (Boas, 2006) definida por

$$\delta(r) = \begin{cases} 0, se \ r \neq 0\\ \infty, se \ r = 0 \end{cases}$$
(3.44)

com

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(r) dr = 1 \tag{3.45}$$

A curvatura Gaussiana *K* é zero para $r \neq 0$ (Inomata, Junker *et al.*, 2012). Assim, usando como referencia o modelo exposto em um dos artigos de (Dacosta, 1981), podemos concluir que a curvatura total da superfície é

$$H^2 = \frac{[k(s)]^2}{4} \tag{3.46}$$

onde o termo do lado direito da igualdade equivale a curvatura total da superfície. Substituindo (3.43) em (3.46) obtemos

$$\left(\frac{\sqrt{1-\alpha'^2}}{2\alpha' r}\right)^2 = \frac{[k(s)]^2}{4}$$
(3.47 a),

$$\frac{1-{\alpha'}^2}{4{\alpha'}^2r^2} = \frac{[k(s)]^2}{4}$$
(3.47 b),

$$k(s) = \frac{\sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{{\alpha'}r}$$
(3.47 c).

para $\alpha' > 0$ e r > 0.

Podemos interpretar geometricamente a desclinação através do processo de Volterra (Puntigam e Soleng, 1997; Moraes, 2000), na qual é dividida em três etapas mostradas na figura 1.3. Podemos também observar que se α' for negativo, devemos ter $-1 < \alpha' < 0$, representando a retirada da estrutura, e, se α' for positivo, $0 < \alpha' < 1$ teremos a inserção da estrutura. Portanto, a relação dada na equação (3.47 *c*) nos permite calcular a dimensão do defeito produzido. Porém, neste trabalho consideramos que α' admita apenas valores positivos. Dessa forma, é fácil verificar, que se o ângulo diedral (ângulo formado por dois planos concorrentes) mostrado na relação (1.2) for igual ao ângulo produzido pelo processo de Volterra, como mostra a terceira etapa da figura 1.3, então o comprimento de arco da região complementar da figura, ou seja, de um círculo sem a fatia é

$$s = 2\pi\alpha' r \tag{3.48}$$

Então, da expressão (3.47 c) podemos expressar a curvatura como:

$$k(s) = \frac{2\pi\sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{s}$$
(3.49)

Assim, o resultado para o potencial efetivo constante pode ser expresso em termos do defeito topológico (desclinação) como

$$U_0 = \frac{1}{8m} \hbar^2 \left[\frac{2\pi \sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{s} \right]^2$$
(3.50)

Podemos observar na relação acima, que a presença do defeito (desclinação) diminui a energia potencial. Este potencial efetivo constante aparece sempre quando tentamos investigar a dinâmica da partícula em um espaço com

curvatura total diferente de zero. Nota-se que enquanto α ' atinge seu valor máximo, isto é, $\alpha' \rightarrow 1$, a energia potencial tende a zero.

Podemos também observar que, se $U_0 = 0$ teríamos a partícula se movendo livremente na região 0 < s < l. Isso significaria que não haveria perturbação que interfira no movimento da partícula ao longo da coordenada longitudinal. Então, podemos dizer que o defeito topológico controla a intensidade do potencial. Em outras palavras, podemos aumentar ou diminuir a intensidade do potencial U_0 na medida em que variamos o valor de α' .

Agora o nosso objetivo é encontrar os autovalores (espectro de energia) de um anel quântico distorcido na presença de um defeito topológico (desclinação). Para isso, consideremos a equação (3.37) que descreve a dinâmica da partícula ao longo da coordenada longitudinal *s* podendo ainda ser reescrita em termo de uma coordenada angular *x*. Ao adicionarmos a esta equação um potencial de confinamento V(x), teremos

$$-\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \frac{d^2 \tilde{\Gamma}(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \tilde{\Gamma}(x) = E_L \tilde{\Gamma}(x)$$
(3.51)

onde m é a massa da partícula, r_0 é o raio do anel e V(x) é a energia potencial responsável pelo confinamento da partícula. Este potencial admite valores tais que, (Netto, 2006)

$$V(x) = \begin{cases} 0 , & \text{se } 0 \le x \le 2\pi\alpha' \\ \infty , & \text{se caso contrário} \end{cases}$$
(3.52)

Atendendo a condição acima, podemos reescrever a equação (3.52) por

$$\frac{\mathrm{d}^2 \tilde{\Gamma}(x)}{\mathrm{d}x^2} + l^{\prime 2} \tilde{\Gamma}(x) = 0 \tag{3.53}$$

em que definimos l'^2 como

$$l'^2 = \frac{1}{4} + \frac{2mr_0^2 E_L}{\hbar^2} \tag{3.54}$$

A solução geral da equação (3.53) é dada por

$$\tilde{I}(x) = \operatorname{Asen} l'x + \operatorname{Bcos} l'x \tag{3.55}$$

onde A e B são constantes.

Vamos agora encontrar as autofunções de onda que satisfaz a equação (3.52). Para isso utilizamos a seguinte condição de contorno

$$\tilde{\Gamma}(0) = \tilde{\Gamma}(0) = 0 \tag{3.56}$$

com $\theta = 2\pi \alpha'$. Devido a condição acima a expressão (3.55) toma a forma

$$\tilde{\Gamma}(x) = \operatorname{Asen} l'x \tag{3.57}$$

A segunda condição de contorno exige que

$$Asenl'\theta = 0 \tag{3.58}$$

Para que esta igualdade seja satisfeita é necessário que o argumento da função seno assuma valores múltiplos inteiros de π . Assim, teremos

$$l'\theta = n\pi \quad , \quad n \in \mathbb{N} \tag{3.59}$$

Dessa forma, l possuirá valores restritos de modo que

$$l'_n = \frac{n\pi}{\theta} \tag{3.60}$$

Logo, a função de onda que satisfaz as condições de contorno escritas em (3.56) é, portanto,

$$\tilde{I}_{l'n}(x) = \operatorname{Asen}(l'_n x) \tag{3.61}$$

com $n = 0,1,2 ..., e l'_n$ dado em (3.61).

Partiremos agora para os autovalores de energia, os quais estão associados às autofunções. De (3.54) podemos expressar o espectro de energia como

$$E_{L_{x,l'n}} = \frac{{l'_n}^2 \hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \quad , \qquad n \in \mathbb{N}$$
(3.62)

ou

$$E_{L_{x,l'n}} = \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} \left(\frac{n^2}{\alpha'^2} - 1\right) , \qquad n \in \mathbb{N}$$
 (3.63)

Este é o espectro de energia para uma partícula se movendo na superfície de um cilindro. Para a obtenção desse resultado consideramos, a priori, um cilindro de raio constante r_0 . No entanto, para um anel distorcido, temos os raios r_1 e r_2 em função dos ângulos β , φ e α (ver figura 2.2). Alem disso, podemos expressar o raio r_0 da seguinte forma

$$r_0 = \left(\frac{2\pi r_2 - l}{r_2}\right)\frac{r_1}{\theta} + \frac{l}{\theta}$$
(3.64)

Obtemos a expressão acima utilizando a seguinte relação

$$\mathbf{L} = r_0 \mathbf{\theta} \tag{3.65}$$

em que L é o comprimento total do arco, definido por,

$$L = \left(\frac{2\pi r_2 - l}{r_2}\right)r_1 + l$$
 (3.66)

e θ é a medida angular da circunferência.

Assim, substituindo as expressões (3.60), (3.64) em (3.62), e lembrando que $\theta = 2\pi \alpha'$, o espectro de energia se torna

$$E_{L_{X,l'n}} = \frac{1}{\left[\left(\frac{2\pi r_2 - l}{r_2}\right)r_1 + l\right]^2} \left\{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \pi^2 {\alpha'}^2}{2m}\right\} \quad n \in \mathbb{N}$$
(3.67)

Finalmente, chegamos à expressão dos níveis de energia para um anel quântico distorcido na presença de um defeito topológico. Este resultado está consistente com o mesmo encontrado na literatura (Braga, 2011). Para verificarmos a consistência do resultado é conveniente fazer alguns casos limite. Analisemos, inicialmente, a situação em que o comprimento l tende a zero. Neste caso, o anel distorcido se torna simplesmente um anel de raio r_1 .

Isso nos leva, através da relação (3.67), a condição $r_1 = r_2$. Assim, esta expressão torna-se

$$E_{L_{x,l'n}} = \frac{{l'_n}^2 \hbar^2}{2mr_1^2} - \frac{\hbar^2}{8mr_1^2} , \qquad (3.68)$$

Esta expressão é a mesma obtida em (3.62) que descreve o espectro de energia da partícula se movendo sobre a superfície de um cilindro de raio constante r_1 . Além disso, podemos escrever a relação (3.68) acima em termos de α' .

$$E_{L_{x,l'n}} = \frac{l'_n{}^2\hbar^2}{2m\alpha'{}^2r_0{}^2} - \frac{\hbar^2}{8m\alpha'{}^2r_0{}^2} \quad , \tag{3.69}$$

Analisando este resultado vemos que a primeira parcela é a contribuição devida ao confinamento da partícula na superfície do cilindro na presença de uma desclinação. O segundo termo corresponde ao potencial de confinamento constante, também na presença de uma desclinação, que aparece sempre quando estamos interessados em investigar a dinâmica quântica da partícula em uma superfície bidimensional imersa em um espaço tridimensional. Podemos ainda concluir que a transição da relação (3.68) para (3.69) se dá via $r_1 \rightarrow \alpha' r_0$. Este resultado também nos mostra a relação entre um espaço com e sem desclinação. A transição pode ser obtida partindo da relação (3.47 *c*). Assim teremos

$$k(s) = \frac{\sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{{\alpha'} r_0} = \frac{1}{r_1}$$
(3.70.*a*),

$$\left(\frac{1}{r_1}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{{\alpha'}r_0}\right)^2$$
(3.70.*b*),

$$r_0^2 = \frac{r_1^2 (1 - \alpha'^2)}{\alpha'^2}$$
(3.70.*c*),

$$r_0 = \frac{r_1 \sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{{\alpha'}} \tag{3.70.} d).$$

Para valores de $\alpha' \ll 1$, ou seja, para α' muito próximo de zero, temos o caso

$$r_0 = \frac{r_1 \sqrt{1 - {\alpha'}^2}}{{\alpha'}} \quad \rightarrow \quad r_1 = {\alpha'} r_0 \tag{3.71}$$

onde r_1 é o raio de curvatura total da superfície.

No intitulado trabalho sobre, *Dinâmica Quântica em Espaços com Defeitos* (netto, 2010), o autor encontra uma expressão para os níveis de energia de um anel quântico modelado via potencial parede rígida na presença de uma dispiração, onde neste tipo de confinamento a partícula estaria restrita a se mover na região entre os raios externo e interno de uma casca cilíndrica. Comparando a relação (3.69) com o resultado encontrado na referencia (netto, 2010), observamos um termo que representa a contribuição devido ao confinamento da partícula na presença de um defeito topológico, e outro que representa a contribuição devido à dinâmica da partícula imersa em uma superfície bidimensional. Assim, podemos concluir que, o espectro de energia em (3.67) está em concordância com a literatura.

Capitulo 4

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Pôde-se observar que a distorção aumenta na medida em que a razão entre os raios r_2 e r_1 diminui. Alem disso, podemos observar o que ocorre na relação (3.67) quando r_2 é igual a r_1 . Para esse caso, teríamos a partícula se movendo livremente na superfície de um anel quântico, o que implica em $U_0 = 0$.

Notamos que a introdução de um defeito linear (desclinação) em um anel quântico nos possibilita controlar o valor numérico do potencial geométrico constate. Na medida em que variamos o valor de α' modificamos a intensidade do potencial U_0 . Observamos que se $\alpha' \rightarrow 1$, $U_0 \rightarrow 0$. Para este caso limite, a variação no valor de α' também implica no desaparecimento do potencial constante U_0 .

Vimos que, ao investigarmos a dinâmica da partícula em uma superfície bidimensional introduzida no espaço tridimensional, aparecerá um termo devido à contribuição da curvatura da superfície. Vimos também que a distorção e a desclinação não afeta o movimento da partícula ao longo das coordenadas q_1 e q_3 . Além disso, observamos na relação (3.67) que o espectro de energia de um anel quântico distorcido na presença de uma desclinação é uma generalização do caso em que não há defeito. E, através da transição denotada em (3.71), recuperamos o resultado conhecido na literatura (Braga, 2011) (Netto, 2006).

Apêndice A

Demonstraremos a relação (2.35) da seção 2.2. Observando a Figura 2.2, é conveniente utilizar a lei dos senos. Assim, podemos verificar que

$$\frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{r_1 - r_2} = \frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{2r_2} \tag{1.a},$$

$$sen\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{sen\left(\frac{\varphi}{2}\right)(r_1 - r_2)}{2r_2} \tag{1.b}$$

A função trigonométrica inversa é, portanto,

$$\alpha = 2 \arcsin\left[\frac{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)(r_1 - r_2)}{2r_2}\right]$$
(2)

como queríamos demonstrar.

Apêndice B

Para demonstrar a relação (2.36) da seção 2.2 que trata da expressão

$$r_2^{min} = \frac{sen(\varphi/2)r_1}{2 + sen(\varphi/2)} \tag{3}$$

é fácil verificar, observando a Figura 2.2, que r_2 tem um valor mínimo, se os pontos A, B e C estiverem na mesma linha, ou seja, se α for igual a 180°. Portanto, da relação 1. *b* do Apêndice **A** teremos,

$$2r_2 sen\left(\frac{\alpha}{2}\right) = sen\left(\frac{\varphi}{2}\right)(r_1 - r_2) \tag{4.a},$$

$$2r_2 sen\left(\frac{180^\circ}{2}\right) = sen\left(\frac{\varphi}{2}\right)(r_1 - r_2) \tag{4.b},$$

$$2r_2 sen(90^\circ) = r_1 sen\left(\frac{\varphi}{2}\right) - r_2 sen\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$
(4.c),

$$2r_2 + r_2 sen\left(\frac{\varphi}{2}\right) = r_1 sen\left(\frac{\varphi}{2}\right) \tag{4.d},$$

Logo,

$$r_2^{min} = \frac{sen(\varphi/2)r_1}{2 + sen(\varphi/2)} \tag{5}$$

como queríamos demonstrar.

Referências Bibliográficas

AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. **Physical Review**, v. 115, n. 3, p. 485-491, 1959. ISSN 0031-899X.

BOAS, M. L. **MATHEMATICAL METHODS IN THE PHYSICAL SCIENCES**. UNIVERSITY, D. 2006.

BRAGA, J. P. M. **Técnica Split Operator em Coordenadas Generalizadas**. 2011. 84 Dissertação Universidade Federal do Ceará

DACOSTA, R. C. T. Quantum-Mechanics of a Constrained Particle. **Physical Review A**, v. 23, n. 4, p. 1982-1987, 1981. ISSN 1050-2947.

FILGUEIRAS, C.; MORAES, F. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. **Annals of Physics,** v. 323, n. 12, p. 3150-3157, Dec 2008. ISSN 0003-4916.

FURTADO, C.; BEZERRA, V. B.; MORAES, F. Quantum scattering by a magnetic flux screw dislocation. **Physics Letters A,** v. 289, n. 3, p. 160-166, Oct 15 2001. ISSN 0375-9601.

FURTADO, C.; MORAES, F. Landau levels in the presence of a screw dislocation. **Europhysics Letters,** v. 45, n. 3, p. 279-282, Feb 1 1999. ISSN 0295-5075.

GALLARDO, E. et al. Single-photon emission by semiconductor quantum rings in a photonic crystal. Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics, v. 27, n. 6, p. A21-A24, Jun 2010. ISSN 0740-3224.

GUO, L. J.; KRAUSS, P. R.; CHOU, S. Y. Nanoscale silicon field effect transistors fabricated using imprint lithography. **Applied Physics Letters,** v. 71, n. 13, p. 1881-1883, Sep 29 1997. ISSN 0003-6951.

INOMATA, A.; JUNKER, G.; RAYNOLDS, J. Path integration in the field of a topological defect: the case of dispiration. **Journal of Physics a-Mathematical and Theoretical**, v. 45, n. 7, Feb 24 2012. ISSN 1751-8113.

JOIBARI, F. K.; BLANTER, Y. M.; BAUER, G. E. W. Aharonov-Casher effect in quantum ring ensembles. **Physical Review B,** v. 88, n. 11, Sep 5 2013. ISSN 1098-0121.

KAMIEN, R. D. The geometry of soft materials: a primer. **Reviews of Modern Physics,** v. 74, n. 4, p. 953-971, Oct 2002. ISSN 0034-6861.

KOHMOTO, S. et al. Site-controlled self-organization of individual InAs quantum dots by scanning tunneling probe-assisted nanolithography. **Applied Physics Letters,** v. 75, n. 22, p. 3488-3490, Nov 29 1999. ISSN 0003-6951.

L.D.LANDAU. Non-Relativistic Theory. 3. 1977a.

_____. Quantum Mechanics Non-Relativistic theory. v. 3, p. 691, 1977b.

LEVY, L. P. et al. Magnetization of Mesoscopic Copper Rings - Evidence for Persistent Currents. **Physical Review Letters,** v. 64, n. 17, p. 2074-2077, Apr 23 1990. ISSN 0031-9007.

LONGHI, S. Non-Hermitian quantum rings. **Physical Review A**, v. 88, n. 6, Dec 26 2013. ISSN 1050-2947.

MACHADO, K. D. Equações Diferenciais Aplicadas. 2012. 751.

MARQUES, G. D. et al. Landau levels in the presence of topological defects. **Journal of Physics a-Mathematical and General,** v. 34, n. 30, p. 5945-5954, Aug 3 2001. ISSN 0305-4470.

MELO, B. L. M. D. Computação Quântica: Estado da Arte. p. 4, 2003. Disponível em: < <u>http://www.inf.ufsc.br/~barreto/trabaluno/TCBrunoTulio.pdf</u> >.

MORAES, F. Condensed matter physics as a laboratory for gravitation and cosmology. **Brazilian Journal of Physics,** v. 30, n. 2, p. 304-308, Jun 2000. ISSN 0103-9733.

NETO, V. L. O. **Estrutura Eletrônica de Anéis Quânticos**. 2011. 70 Dissertação de Mestrado Departamento de Física Universidade Federal de São Carlos

NETTO, A. L. D. S. **Dinâmica Quântica em Espaços Curvos:aplicações em Matéria Condensada**. 2006. 63 Dissertação de Mestrado Universidade Federal da Paraiba NETTO, A. L. S.; CHESMAN, C.; FURTADO, C. Influence of topology in a quantum ring. **Physics Letters A,** v. 372, n. 21, p. 3894-3897, May 19 2008. ISSN 0375-9601.

NIELSEN, M. A. Quantum Computation and Information. 10. Cambridge University Press, 2010. 698 ISBN 978-1-107-00217-3.

PEREYRA, P.; CASTILLO, E. Theory of finite periodic systems: General expressions and various simple and illustrative examples. **Physical Review B**, v. 65, n. 20, May 15 2002. ISSN 1098-0121.

PUNTIGAM, R. A.; SOLENG, H. H. Volterra distortions, spinning strings, and cosmic defects. **Classical and Quantum Gravity,** v. 14, n. 5, p. 1129-1149, May 1997. ISSN 0264-9381.

SAKURAI, J. J. **Moder Quantum Mechanics**. 1994. 513 ISBN 0-201-53929-2.

SHEVCHENKO, S. N.; KOLESNICHENKO, Y. A. Effect of curvature on conductance of the quantum wire. **Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures,** v. 14, n. 1-2, p. 177-179, Apr 2002. ISSN 1386-9477.

STRUIK, D. J. Classical Differential Geometry. p. 243, 1961.

_____. Lectures on Classical Differential Geometry. 2. Dover Publications, 1988. 240 ISBN 000-0486656098

SZELAG, M.; SZOPA, M. Persistent currents in distorted quantum ring - art. no. 012006. **Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter,** v. 104, p. 12006-12006, 2008. ISSN 1742-6588.

YAMAMOTO, H. et al. Location Control of Nanoparticles Using Combination of Top-down and Bottom-up Nano-fabrication. Journal of Photopolymer Science and Technology, v. 25, n. 4, p. 449-453, 2012. ISSN 0914-9244.

YAMAMOTO, H. et al. Formation of nanoscale reaction field using combination of top-down and bottom-up nanofabricaiton. **Microelectronic Engineering**, v. 110, p. 369-373, Oct 2013. ISSN 0167-9317.