



PEDRO HENRIQUE SOUZA

**SOBRE OS EFEITOS DA MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA
NO GÁS DE ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES
BIDIMENSIONAL CURVO**

LAVRAS – MG

2018

PEDRO HENRIQUE SOUZA

**SOBRE OS EFEITOS DA MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA NO GÁS DE
ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES BIDIMENSIONAL CURVO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras
Orientador

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva
Coorientador

LAVRAS – MG

2018

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Souza, Pedro Henrique

Sobre os efeitos da massa efetiva anisotrópica no gás
de elétrons não interagentes bidimensional curvo / Pedro
Henrique Souza. – Lavras : UFLA, 2018.

72 p. : il.

Dissertação (mestrado acadêmico)–Universidade Federal
de Lavras, 2018.

Orientador: Prof. Dr. Cleverson Filgueiras.

Bibliografia.

1. Sistemas bidimensionais curvos. 2. Massa efetiva
anisotrópica. 3. Potencial geométrico quântico. I. Filgueiras,
Cleverson. II. Leyva, Moisés Porfírio Rojas. III. Título.

PEDRO HENRIQUE SOUZA

**SOBRE OS EFEITOS DA MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA NO GÁS DE
ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES BIDIMENSIONAL CURVO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Matéria Condensada, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 20 de Julho de 2018.

Dr. Igor Saulo Santos de Oliveira	UFLA
Dra. Tatiana Ramos Cardoso	UFLA
Dr. André Gonçalves de Lima	UFES
Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva	UFLA

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras
Orientador

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva
Co-Orientador

**LAVRAS – MG
2018**

AGRADECIMENTOS

- Agradeço primeiramente aos meus pais e minha irmã, Anna, que me apoiaram em todos os sentidos na minha vida acadêmica e pessoal.
- A Laíze, por estar ao meu lado esses 7 anos, contribuindo na minha evolução pessoal.
- Ao Prof. Dr. Cleverson por me apresentar o encanto da geometria diferencial e se disponibilizar em me orientar neste trabalho. Além de ampliar minha percepção do universo científico.
- Ao Prof. Dr. Moisés Rojas por me coorientar e se disponibilizar em diversos momentos que necessitei de auxílio.
- Aos Profs. Dr. Rodrigo Bufalo e Dra. Tatiana Cardoso pelas inúmeras contribuições neste trabalho, desde bibliografias à amparos matemáticos. Além dos filmes, séries e livros indicados, de Woody Allen à Saramago, que me fizeram evoluir culturalmente.
- Aos irmãos que a física me deu: Rafa, Isaac e Jack. Por fazerem, em diversas ocasiões, eu ficar alegre, reflexivo, estressado e bêbado.
- Ao João por todos os conselhos de Linux, Latex, Gimp, Inkscape, Blender, Mathematica e Counter-Strike
- Aos amigos do DFI: Amanda e suas tiradas engraçadas, Duidinha e sua humildade e dedicação, Piva e suas piadas (tem CD?), Belzinha e seus bolos de cenoura maravilhosos, Romão e Ju que em pouco tempo se tornaram grandes companheiros, Lauzi por nos fazer rir com sua novela da vida real, Benta por encher nossas barrigas com o melhor que se pode imaginar, Pedro Tchê pela psicodelia e conversas filosóficas, Aline e suas informações burocráticas do Departamento e Nayara e seus chás e biscoitos diferentes.
- Por fim agradeço aos órgãos de fomento: CAPES, FAPEMIG e CNPq

RESUMO

A teoria proposta por R.C.T. da Costa, onde é descrita a dinâmica de uma partícula quântica em uma superfície curva, resulta em um potencial geométrico que depende da componente transversal da massa na superfície. Este tratamento pode ser modelado a partir de um sistema de gás de elétrons bidimensional curvo (2DEG). Por outro lado, um elétron se movendo em uma rede cristalina está sob efeito do potencial da rede e sua massa é uma propriedade tensorial, chamada de *massa efetiva*, podendo assumir valores negativos. O presente trabalho tem a proposta de utilizar a abordagem proposta por da Costa e analisar a dinâmica na superfície curva em um cenário onde a massa efetiva é anisotrópica, bem como no caso onde é negativa. Comparando com os casos onde a massa é isotrópica, observa-se consideráveis alterações na dinâmica do sistema. Alguns exemplos de superfície são examinados, tal como uma partícula em uma superfície helicoidal, cilíndrica, um catenoide e em um cone, com possíveis aplicações brevemente discutidas.

Palavras-chave: Sistemas bidimensionais curvos. Massa efetiva anisotrópica. Potencial geométrico quântico.

ABSTRACT

The theory proposed by R.C.T. of the Coast, where the dynamics of a quantum particle on a curved surface is described, results in a geometric potential that depends on the transverse component of the mass on the surface. This treatment can be modeled from a curved two-dimensional electron gas system (2DEG). On the other hand, an electron moving in a crystalline lattice is under the effect of the potential of the lattice and its mass is a tensorial property, called textit effective mass, and can assume negative values. The present work proposes to use the approach proposed by da Costa and to analyze the dynamics in the curved surface in an approach where the effective mass is anisotropic, as well as in the case where it is negative. Comparing with the cases where the mass is isotropic, we observe considerable changes in the dynamics of the system. Some surface examples are examined, such as a particle on a helical, cylindrical, catenoid and cone surfaces, with possible applications briefly discussed.

Keywords: Curved two-dimensional system. Quantum geometric potential. Anisotropic effctive mass.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Seguimento AB	11
Figura 3.2 – Aproximação para Arco C	12
Figura 3.3 – Reta tangente a curva C no ponto P	13
Figura 3.4 – Triedro móvel de uma curva C	16
Figura 3.5 – (a) Vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ em uma curva plana. (b) Vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ de um círculo C de uma esfera S	24
Figura 3.6 – Vetor curvatura normal	27
Figura 4.1 – Superfície S	30
Figura 4.2 – (a) Junção cilíndrica de raios diferentes; (b) Superfície cilíndrica curvada	37
Figura 5.1 – Bandas de energia	41
Figura 6.1 – Helicoide	46
Figura 6.2 – Material isotrópico ($m_1 = m_2$)	48
Figura 6.3 – Material anisotrópico ($m_1 \neq m_2 > 0$)	48
Figura 6.4 – Metamaterial ($m_1 > 0$ e $m_2 < 0$)	49
Figura 6.5 – Junção cilíndrica e seu potencial	51
Figura 6.6 – Reflexão e Transmissão eletrônica na junção cilíndrica	53
Figura 6.7 – Catenoide com eixo ao longo do eixo z e raio do gargalo R	54
Figura 6.8 – Aparecimento de uma barreira de potencial para um metamaterial quando $\varepsilon = \ell = 0$	55
Figura 6.9 – Barreira de potencial para um metamaterial e um poço duplo invertido para um material ordinário anisotrópico	56
Figura 6.10 – Um poço de potencial duplo é obtido quando as componentes da massa efetiva referente a superfície é negativa	56
Figura 6.11 – Superfície de um cone sob efeito de um campo magnético uniforme	58
Figura 6.12 – Condutividade Hall versus o campo magnético em um cone. Considerando $T=300K$	60
Figura 6.13 – Condutividade Hall versus o potencial químico em um cone. Considerando $B=3T$	61
Figura 1 – Base de vetores não ortogonal	70

SUMÁRIO

1	AGRADECIMENTOS	2
2	INTRODUÇÃO	8
3	UM POUCO SOBRE GEOMETRIA DIFERENCIAL LOCAL	10
3.1	Teoria de Curvas	10
3.1.1	Comprimento de Arco	11
3.1.2	Tangente, Plano Normal e Plano Osculador	12
3.1.3	Normal Principal e Curvatura	14
3.1.4	Binormal e Triedro Móvel	15
3.1.5	Torção	15
3.1.6	Fórmulas de Frenet	17
3.2	Superfícies	18
3.2.1	Conceito de superfície	19
3.2.2	Curvas imersas em superfícies. Vetor tangente e espaço tangente à superfície	20
3.2.3	Primeira forma fundamental (PFF). Conceito de geometria Riemanniana . .	21
3.2.4	Vetor Normal à superfície	21
3.2.5	Como medir ângulo e área em uma superfície	22
3.3	Segunda Forma Fundamental (SFF)	23
3.3.1	Invariância sob transformações	25
3.3.2	Interpretação de curvatura em superfícies	25
3.3.3	Curvatura Gaussiana e Média	27
4	POTENCIAL GEOMÉTRICO QUÂNTICO	30
4.1	O tensor métrico	31
4.2	Aplicações do potencial geométrico quântico	36
5	MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA	39
5.1	Uma breve descrição da Teoria de Bandas	39
5.2	Dinâmica de elétrons em um cristal: Massa Efetiva	41
5.3	Metamateriais eletrônicos	43
5.3.1	Parâmetros análogos entre elétrons em uma rede cristalina e ondas eletro- magnéticas	43
6	GÁS DE ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES BIDIMENSIONAL CURVO COM MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA	45

6.1	Uma partícula quântica em um helicóide	45
6.2	Propriedades de transmissão em uma junção cilíndrica isotrópica/anisotrópica	49
6.2.1	Determinando e aplicando as condições de contorno	52
6.2.2	Coeficiente de reflexão e transmissão	53
6.3	Potencial geométrico induzido em um Catenoide	54
6.4	Efeito Hall Quântico em um Cone	57
6.4.1	Níveis de Landau para uma partícula em um cone	57
6.4.2	Efeito Hall quântico em um cone	59
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	62
	REFERÊNCIAS	63
	APENDICE A – Curvatura para um parâmetro generalizado t	65
	APENDICE B – Torção em termos das derivadas da função $x(s)$	66
	APENDICE C – Discriminante da Primeira Forma Fundamental como po- sitivo definido	67
	APENDICE D – Segunda derivada do vetor x com respeito ao arco s	69
	APENDICE E – Propriedades tensoriais do tensor métrico	70
	APENDICE F – Uma breve abordagem sobre efeito Hall quântico	71

INTRODUÇÃO

A Matemática é a linguagem utilizada pela Física. Sendo assim, diversas ferramentas matemáticas contribuem para a descrição de fenômenos físicos. Uma destas ferramentas é a geometria diferencial, uma união do cálculo com a geometria.

Em cristais, os átomos estão arranjados em uma estrutura periódica, chamada rede cristalina, qualquer irregularidade na periodicidade na rede caracteriza um defeito. A descrição física destes defeitos faz uso do formalismo presente em geometria diferencial (KRÖNER, 1990). Para o presente trabalho, a geometria diferencial tem valor significativo, tendo em vista que o propósito é estudar a dinâmica quântica em superfícies curvas e estas superfícies são caracterizadas com o uso da geometria diferencial.

Por outro lado, a descrição de uma partícula quântica em uma superfície curva não é um exercício trivial. Em 1981, R.C.T. da Costa apresentou uma abordagem, com o uso de geometria diferencial, que possibilita o estudo de partículas quânticas em superfícies curvas. Nesta abordagem, da Costa considera *uma superfície curva arbitrária, imersa no espaço tridimensional*, onde uma partícula quântica está sob vínculo de um dado potencial de confinamento que depende apenas da coordenada perpendicular a superfície. Pressupondo um caso não relativístico, a dinâmica desta partícula pode ser analisada pela equação de Schrödinger. Escrevendo o Laplaciano da equação em coordenadas curvilíneas e considerando uma função de onda separável em uma parte tangente à superfície e outra normal é possível analisar a dinâmica na superfície (COSTA, 1981). Como consequência, observa-se a presença de um potencial com dependência apenas de parâmetros intrínsecos a superfície, no caso as curvaturas Gaussiana e Média, ou seja, para cada superfície tem-se um *potencial geométrico quântico* diferente. Este tratamento supõe que a partícula não interage com outras partículas, isto pode ser modelado em um gás de elétrons não interagentes bidimensional curvo.

Em geral, nos materiais cristalinos o transporte eletrônico acontece em uma perspectiva não relativística, o que possibilita a descrição do movimento dos elétrons a partir da equação de Schrödinger, onde o potencial é o potencial da rede cristalina oriundo dos átomos da rede. Por efeitos do potencial da rede a massa medida do elétron é chamada de *massa efetiva*, no qual é a massa do elétron sob efeitos. Neste contexto, a massa efetiva é uma propriedade tensorial, ou seja, pode assumir direções distintas caracterizando uma *anisotropia* de massa. Além disso, estas direções podem ser negativas, resultando em uma massa efetiva negativa (KITTEL, 2005).

Pode parecer estranho uma massa negativa, porém algumas constantes físicas consideradas positivas e imutáveis foram descritas na literatura como negativas. Em certos materiais artificiais, ao incidir um campo eletromagnético percebe-se que as constantes de permissividade elétrica ϵ e permeabilidade magnética μ apresentam valores negativos (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2007). Este materiais foram denominados *metamateriais* óticos.

O presente trabalho tem o intuito de analisar a dinâmica de uma partícula quântica em superfícies curvas onde a massa efetiva anisotrópica é aplicada, além da possibilidade de valores negativos, ou seja, um metamaterial eletrônico. Na seção 3 é apresentado um pouco sobre geometria diferencial local, em seguida na seção 4 está descrito o potencial geométrico quântico, na seção 5 é exposto o conceito de massa efetiva anisotrópica e, por fim, é apresentado o modelo de um gás de elétrons não interagentes bidimensional curvo com massa efetiva anisotrópica. Foram consideradas a superfície do helicóide, cilindro, catenoide e superfície cônica. No caso do cone também é considerado um campo magnético aplicado na superfície. Estas superfícies foram escolhidas pelo fato dos significativos resultados encontrados. Além disso, estes resultados foram comparados com os trabalhos presentes na literatura, onde se considera massa efetiva isotrópica.

UM POUCO SOBRE GEOMETRIA DIFERENCIAL LOCAL

Neste capítulo são introduzidas ferramentas matemáticas necessárias para o estudo em questão. Estas ferramentas fazem parte de uma ampla e refinada área da matemática denominada Geometria Diferencial. Esta área é de grande importância para a compreensão do mundo físico, por exemplo, para analisar a dinâmica quântica de uma partícula sem spin confinada em uma variedade m -dimensional M^m imersa no espaço euclidiano n -dimensional R^n . Primeiramente, é necessário definir um sistema de coordenadas no qual facilite a separação de uma parte normal a variedade¹ e outra parte tangencial (SCHUSTER; JAFFE, 2003). Em Mecânica Clássica, para o movimento curvilíneo, por exemplo, o estudo do movimento é fundamentado em teoria de curvas, quanticamente, temos o espaço curvo da Relatividade Geral fundamentado em uma superfície curva (Geometria Riemanniana) e para descrição das propriedades de materiais leva-se em consideração não apenas os constituintes atômicos mas também a geometria que o rodeia (FILGUEIRAS, 2009). A seguir, será abordando apenas uma síntese de teoria de curvas, conceito de superfície, primeira e segunda forma fundamental, inspirados no livro *Differential Geometry* de Erwin Kreyszig (KREYSZIG, 1991).

3.1 Teoria de Curvas

O estudo de curvas é necessário para futura compreensão de superfícies curvas. Para dar início a descrição de curvas, vamos partir da determinação de um ponto qualquer no espaço Euclidiano $\mathbb{R}^3$, para um dado sistema de coordenadas Cartesiana, a partir de um vetor posição

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3), \quad (3.1)$$

onde x_1, x_2 e x_3 são coordenadas generalizadas. Escrevendo este vetor e suas coordenadas em termos de um parâmetro generalizado t , definido no intervalo $I: a \leq t \leq b$,

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(x_1(t), x_2(t), x_3(t)), \quad (3.2)$$

de modo que satisfaça as seguintes condições:

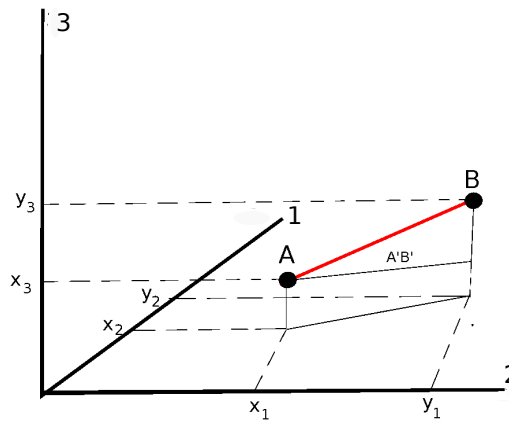
¹ Uma variedade é a generalizações da nossa ideia sobre curvas e superfícies de objetos em dimensão arbitrárias (NAKAHARA, 2003)

- As funções $x_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$) possuam derivadas r (≥ 1) vezes contínua. Onde r é o número de vezes da continuidade das funções.
- Para cada valor de r em I no mínimo uma das três funções, $x'_i(t) \equiv \frac{dx_i(t)}{dt}$, seja diferente de zero.

Satisfazendo as condições, chamamos a equação 3.2 de *representação paramétrica permitida*. Além disso, para um conjunto de pontos M no espaço que possa ser descrito por uma representação paramétrica permitida denomina-se uma *curva*.

3.1.1 Comprimento de Arco

Figura 3.1 – Seguimento AB



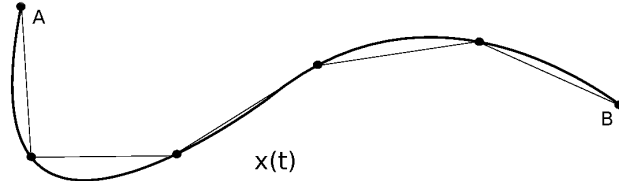
Fonte: Autor

Dado um seguimento AB conforme a figura 3.1, onde $(A'B')^2 = (y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2$. Por Pitágoras temos que o comprimento de AB é dado pela expressão

$$l = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^3 (y_i - x_i)^2 \right)}. \quad (3.3)$$

Para uma curva C descrita pela equação 3.2, o comprimento de arco pode ser aproximado pela soma de seguimentos que possuam seus pontos finais e iniciais no arco C , como mostra a figura 3.2 Fazendo uma soma de seguimentos infinitesimais com seus pontos iniciais e finais presentes na curva, o comprimento de arco C é determinado com a expressão,

$$s = \int_a^b \sqrt{\left\{ \sum_{i=1}^3 \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 \right\}} dt = \int_a^b \sqrt{(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}')} dt, \quad (3.4)$$

Figura 3.2 – Aproximação para Arco C 

Fonte: Autor

onde $\mathbf{x}' \equiv \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt}$. Definindo a priori, derivadas com respeito a um parâmetro qualquer será indicado por uma linha (') e derivadas com respeito ao comprimento de arco s será indicado por um ponto, por exemplo $\dot{\mathbf{x}}$.

A partir da equação 3.4 o *elemento de arco* ds pode ser escrito em sua forma quadrática,

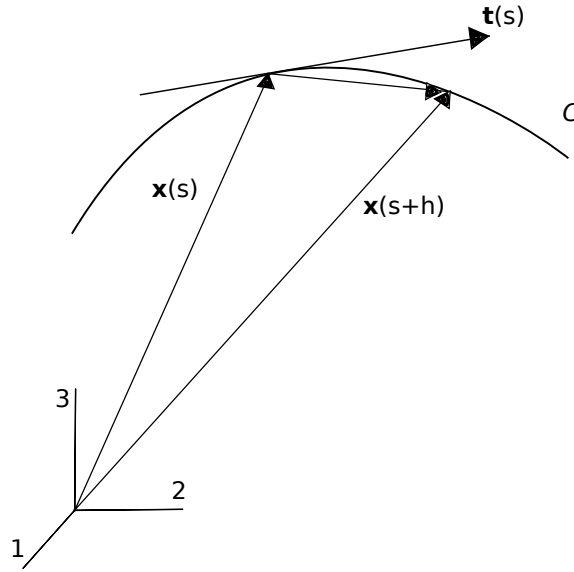
$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}. \quad (3.5)$$

3.1.2 Tangente, Plano Normal e Plano Osculador

A análise clássica de uma partícula se movendo em um plano, parte da definição de um vetor posição, similar ao vetor da equação (3.2), onde temos como parâmetro o tempo. A partir do vetor posição é possível prever a velocidade instantânea da partícula, ou seja, a velocidade para $\Delta t \rightarrow 0$, dado por:

$$\mathbf{v}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t} \right) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}. \quad (3.6)$$

A medida em que $\Delta t \rightarrow 0$ é observado que a direção da velocidade instantânea é da tangente à trajetória (NUSSENZVEIG, 2018). Isto é uma consequência da definição de vetor tangente à uma curva descrito em Geometria Diferencial.

Figura 3.3 – Reta tangente a curva C no ponto P 

Fonte: Autor

Na figura 3.3, temos uma curva arbitrária C no espaço $\mathbb{R}^3$, que poderia ser o movimento curvilíneo de uma partícula, $\mathbf{x}(s)$ é a representação paramétrica de C com o comprimento de arco s como parâmetro. Dois vetores posição são descritos, um para um certo valor de s e o outro para $s+h$; a partir destes dois pontos podemos escrever o vetor $\frac{\mathbf{x}(s+h)-\mathbf{x}(s)}{h}$ e assim definir o *vetor tangente unitário* da curva C no ponto $\mathbf{x}(s)$, dado por

$$\mathbf{t}(s) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{x}(s+h) - \mathbf{x}(s)}{h} = \frac{d\mathbf{x}}{ds} = \dot{\mathbf{x}}(s), \quad (3.7)$$

tal qual o vetor velocidade tangencial. Caso seja introduzido qualquer outro parâmetro t temos,

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{\mathbf{x}'}{\sqrt{\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}'}} \quad (3.8)$$

consequentemente,

$$\mathbf{t}(t) = \frac{\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}'|} \quad (3.9)$$

Para um certo ponto P pertencente a curva C todos os vetores ortogonais ao vetor tangente a este ponto, formam o que chamamos de *plano normal* a C no ponto P . Além disso, o plano formado pelos vetores $\mathbf{x}'(t)$ e $\mathbf{x}''(t)$ chamamos de *plano osculador*.

3.1.3 Normal Principal e Curvatura

Um conceito importante para a descrição de uma curva é a sua curvatura. Para definir curvatura, primeiramente, imagine uma curva arbitrária C dada a partir da representação paramétrica $\mathbf{x}(s)$ de classe $r \geq 2$. Já sabemos que o vetor tangente é unitário de modo que, $\mathbf{t} \cdot \mathbf{t} = 1$. Se derivarmos esta expressão com respeito a s obtemos $\mathbf{t} \cdot \dot{\mathbf{t}} + \dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{t} = 0$. Isso só é verdade se o vetor $\dot{\mathbf{t}}$ for ortogonal ao vetor tangente, ou seja, se $\dot{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{t} = 0$.

Portanto, sabendo que $\dot{\mathbf{t}} = \ddot{\mathbf{x}}$, podemos definir um vetor ortogonal ao vetor tangente a curva chamado de *vetor normal principal*, dado por

$$\mathbf{p}(s) = \frac{\dot{\mathbf{t}}(s)}{|\dot{\mathbf{t}}(s)|}. \quad (3.10)$$

Fisicamente, podemos associar o vetor normal principal com a aceleração centrípeta. A partir da equação (3.6) podemos extrair a aceleração instantânea, definida como a derivada do vetor velocidade com relação ao tempo, dado como o parâmetro. Vale ressaltar que a aceleração não está associada apenas à variação do módulo da velocidade mas também na variação da direção do vetor velocidade, ou seja, em um movimento curvilíneo por mais que o módulo da velocidade não sofra alteração a direção do vetor velocidade altera e consequentemente temos uma aceleração centrípeta relacionada (NUSSENZVEIG, 2018).

Por conseguinte, chamamos o valor absoluto do vetor $\dot{\mathbf{t}}$ de *curvatura* da curva C no ponto $\mathbf{x}(s)$, ou seja,

$$\kappa(s) = |\dot{\mathbf{t}}(s)| = \sqrt{(\ddot{\mathbf{x}}(s) \cdot \ddot{\mathbf{x}}(s))}. \quad (3.11)$$

Assim sendo, para um movimento onde a curvatura é igual a zero conclui ser um movimento em uma reta e não um movimento curvilíneo. O recíproco da curvatura é chamado de raio de curvatura,

$$\rho(s) = \frac{1}{\kappa(s)}, \quad (3.12)$$

dependendo da necessidade pode-se usar o *vetor curvatura* da curva C ,

$$\mathbf{k}(s) = \dot{\mathbf{t}}(s). \quad (3.13)$$

Com base na equação (3.5) podemos escrever uma expressão analítica de curvatura para qualquer parâmetro t de uma curva C (Apêndice A) cuja parametrização $\mathbf{x}(t)$ de classe $r \geq 2$. Esta expressão tem a forma

$$\kappa = \frac{\sqrt{\{(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}')(\mathbf{x}'' \cdot \mathbf{x}'') - (\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}'')^2\}}}{(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}')^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.14)$$

3.1.4 Binormal e Triedro Móvel

Até agora temos associado a uma curva arbitrária C dois vetores unitários:

- Vetor tangente: $\mathbf{t}(s) = \dot{\mathbf{x}}(s)$
- Vetor Normal: $\mathbf{p}(s) = \frac{\dot{\mathbf{t}}(s)}{|\dot{\mathbf{t}}(s)|} = \frac{\dot{\mathbf{t}}(s)}{\kappa(s)} = \rho(s)\dot{\mathbf{t}}(s)$

A partir destes dois vetores podemos associar um terceiro vetor, chamado de *vetor binormal unitário*, descrito na forma

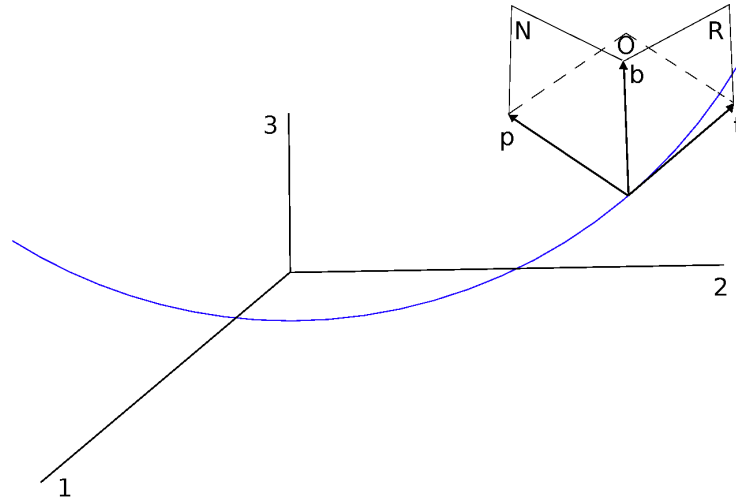
$$\mathbf{b}(s) = \mathbf{t}(s) \times \mathbf{p}(s). \quad (3.15)$$

Agora com estes três vetores unitários $\mathbf{t}$, $\mathbf{p}$ e $\mathbf{b}$, temos o que chamamos de o *triedro móvel* de uma curva. Na figura 3.4 podemos observar o triedro e os planos formados pelos pares de vetores. Os vetores $\mathbf{t}$ e $\mathbf{p}$ formam o *plano osculador*, o *plano normal* é formado pelos vetores $\mathbf{b}$ e $\mathbf{p}$ e, por fim, os vetores $\mathbf{t}$ e $\mathbf{b}$ formam o que chamamos de *plano retificador*.

3.1.5 Torção

Na seção 3.1.3, foi visto que $\kappa(s)$ mede a taxa de variação do vetor $\mathbf{t}(s)$ ao longo de uma curva C . Este "movimento" de $\mathbf{t}(s)$ ao longo da curva é descrito perfeitamente em um plano e como o objetivo é a descrição de curvas imersas no $\mathbb{R}^3$ existe a necessidade da medida da taxa de variação de um plano desta curva, ou seja, o comportamento da curva no espaço. Para isso será inserido o conceito de *torção*.

Na figura 3.4 podemos observar o plano osculador formado pelos vetores unitários $\mathbf{t}$ e $\mathbf{p}$, além disso, temos o vetor $\mathbf{b}$ normal a este plano. Para o caso de uma curva plana, ou seja, uma curva imersa em um plano, o vetor $\mathbf{b}$ é um vetor constante, $\dot{\mathbf{b}} = 0$, e o plano osculador coincide

Figura 3.4 – Triedro móvel de uma curva C 

Fonte: Autor

com o plano da curva. Por outro lado, para o caso onde $\mathbf{b}$ não é constante o plano osculador não coincide com o plano da curva, assim, a curva "emerge" para o $\mathbb{R}^3$.

A partir destas considerações temos que

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{b} = 1 \quad e \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{t} = 0, \quad (3.16)$$

derivando ambas as expressões com respeito ao comprimento de arco s ,

$$\mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{b}} = 0 \quad e \quad \dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{t} + \mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{t}} = 0. \quad (3.17)$$

Desde que $\dot{\mathbf{t}} = \kappa \mathbf{p}$ podemos escrever

$$\dot{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{t} = -\mathbf{b} \cdot \dot{\mathbf{t}} = \kappa \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} = 0. \quad (3.18)$$

Assim, caso não seja nulo, o vetor $\dot{\mathbf{b}}$ é ortogonal tanto a $\mathbf{t}$ quanto a $\mathbf{b}$, ou seja, o vetor $\dot{\mathbf{b}}$ só pode ser um múltiplo escalar de $\mathbf{p}$. Da seguinte forma,

$$\dot{\mathbf{b}}(s) = -\tau(s) \mathbf{p}(s), \quad (3.19)$$

fazendo o produto escalar em $\mathbf{p}$ de ambos os lados,

$$\tau(s) = -\mathbf{p}(s) \cdot \dot{\mathbf{b}}(s), \quad (3.20)$$

$\tau(s)$ é chamado de *torção* da curva C em um ponto $\mathbf{x}(s)$.

Na equação 3.20 o sinal negativo possui significado geométrico, garantindo que curvas dextróginas² possuam valor positivo de torção. Além disso, chamamos o recíproco da torção de *raio de torção*, dado por

$$\sigma = \frac{1}{\tau} \quad (3.21)$$

Por fim, outra forma interessante de escrever a torção é a partir da função $\mathbf{x}(s)$ e suas derivadas, para isso é necessário inserir a equação 3.15 na equação 3.20 (Apêndice B), assim obtemos

$$\tau = -\frac{|\ddot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} \cdot \ddot{\mathbf{x}}|}{\ddot{\mathbf{x}} \cdot \ddot{\mathbf{x}}}, \quad (3.22)$$

esta notação pode parecer estranha, mas partiu-se da seguinte definição

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \det \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} = |\mathbf{abc}|. \quad (3.23)$$

3.1.6 Fórmulas de Frenet

As fórmulas de Frenet têm como objetivo escrever as primeiras derivadas $\dot{\mathbf{t}}$, $\dot{\mathbf{p}}$ e $\dot{\mathbf{b}}$ como uma combinação linear dos vetores unitários $\mathbf{t}$, $\mathbf{p}$ e $\mathbf{b}$. Até o momento já temos duas das três fórmulas de Frenet, que são

$$\dot{\mathbf{t}} = \kappa \mathbf{p} \quad e \quad \dot{\mathbf{b}} = -\tau \mathbf{p}, \quad (3.24)$$

agora é necessário encontrar um análogo para $\dot{\mathbf{p}}$. Derivando com respeito ao comprimento de arco s a expressão $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = 1$, obtemos $\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{p}} = 0$. Se este vetor não é nulo então podemos afirmar que ele é ortogonal a $\mathbf{p}$ e assim pode ser escrito da seguinte forma

$$\dot{\mathbf{p}} = a\mathbf{t} + c\mathbf{b}. \quad (3.25)$$

² Curvas dextróginas são curvas que se voltam para a direita.

Realizando o produto escalar com $\mathbf{t}$ e depois $\mathbf{b}$ na equação 3.25 e desde que $\mathbf{t} \cdot \mathbf{b} = 0$ obtemos

$$a = \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{t} \quad e \quad b = \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{b} \quad (3.26)$$

Temos então a necessidade de encontrar o valor de $\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{t}$ e de $\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{b}$, para isso vamos começar derivando com respeito ao comprimento de arco s a expressão $\mathbf{p} \cdot \mathbf{t} = 0$. Obtemos $\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{t} + \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{t}} = 0$, sabendo que $\dot{\mathbf{t}} = \kappa \mathbf{p}$, então encontramos

$$\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{t} = -\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{t}} = -\kappa \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = -\kappa. \quad (3.27)$$

Realizando o mesmo processo para $\mathbf{p} \cdot \mathbf{b} = 0$ e usando a equação 3.20 obtemos

$$\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{b} = -\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{b}} = \tau. \quad (3.28)$$

Por fim, obtemos as *fórmulas de Frenet*:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{t}} &= \kappa \mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\kappa \mathbf{t} + \tau \mathbf{b}, \\ \dot{\mathbf{b}} &= -\tau \mathbf{p}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

em notação matricial,

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{t}} \\ \dot{\mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{b}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{p} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

3.2 Superfícies

Para o presente trabalho o arcabouço matemático da geometria diferencial de superfícies é de muita importância. Nos próximos capítulos ficará mais claro a aplicação destes conceitos quando, por exemplo, for necessário descrever o movimento de uma partícula em uma certa superfície.

3.2.1 Conceito de superfície

O estudo das propriedades geométricas de superfícies será limitado, como em teoria de curvas, no espaço euclidiano $\mathbb{R}^3$, onde temos uma descrição local de uma superfície, ou seja, pelos próprios significados de geometria diferencial, uma outra abordagem, não abordada no presente trabalho, seria uma análise topológica, no qual é estudado uma variedade como um todo e não uma análise local (NAKAHARA, 2003).

Sendo assim, tomando um sistema de coordenadas cartesiano, como vimos, um vetor posição pode ser descrito por $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Tomando uma função vetorial do tipo

$$\mathbf{x}(u^1, u^2) = (x_1(u^1, u^2), x_2(u^1, u^2), x_3(u^1, u^2)), \quad (3.31)$$

onde u^1 e u^2 são duas variáveis limitadas em um domínio B de um plano $u^1 u^2$. A partir da equação (3.31) para qualquer ponto (u^1, u^2) do domínio B podemos associar um ponto do $\mathbb{R}^3$ com o vetor posição $\mathbf{x}(u^1, u^2)$.

Até então nada nos garante que a equação (3.31) é de uma superfície, podendo ser de uma curva sem problemas, para que ela corresponda a uma equação de uma superfície deve satisfazer os seguintes axiomas:

- $\mathbf{x}(u^1, u^2)$ é de classe $r \geq 1$ em B. Cada ponto de um conjunto M do $\mathbb{R}^3$ corresponda apenas um par ordenado (u^1, u^2) em B
- A matriz Jacobiana

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial u^1} & \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial u^1} & \frac{\partial x_2}{\partial u^2} \\ \frac{\partial x_3}{\partial u^1} & \frac{\partial x_3}{\partial u^2} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

é de *rank* 2 em B, ou seja, as duas colunas dessas matriz são linearmente independentes ou contiver pelo menos um determinante não nulo onde a equação resultante seja uma equação de 2º grau.

Diante disso, se a matriz 3.32 for de *rank* 1 em B então $\mathbf{x}(u^1, u^2)$ é uma representação de uma curva. Por outro lado, pode haver alguma circunstância onde o *rank* seja 1 em um certo ponto de B devido a escolha da representação. Por exemplo, o plano $x_1 x_2$ pode ser representado como:

(a) $\mathbf{x}(u^1, u^2) = (u^1, u^2, 0)$ em coordenadas cartesianas.

(b) $\mathbf{x}(u^1, u^2) = (u^1 \cos u^2, u^1 \sin u^2, 0)$ em coordenadas polares.

Suas matrizes Jacobiana correspondentes ficam da seguinte forma :

$$J_a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_b = \begin{pmatrix} \cos u^2 & -u^1 \sin u^2 \\ \sin u^2 & u^1 \cos u^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

J_a possui *rank* 2, J_b também possui *rank* 2, porém para uma escolha específica de $u^1 = 0$, ou seja, na origem, temos uma particularidade, obtermos uma matriz de *rank* 1. Deste modo, a escolha da representação pode influenciar diretamente na descrição dos pontos da superfície.

3.2.2 Curvas imersas em superfícies. Vetor tangente e espaço tangente à superfície

Como estamos interessados em uma análise local da superfície, podemos imaginá-la sendo uma família de curvas que estão imersas em uma superfície. Uma curva na superfície $S: \mathbf{x}(u^1, u^2)$ pode ser determinada por uma representação do tipo

$$u^1 = u^1(t) \quad e \quad u^2 = u^2(t), \quad (3.34)$$

onde t é uma variável real. De fato, ao aplicarmos a equação (3.34) na equação (3.31) encontramos a equação de uma curva, ou seja, a equação (3.2).

Agora imaginando todas as curvas de S que passam em um certo ponto P e a partir destas curvas sejam construídos vetores tangentes. Estes vetores encontram-se no *plano tangente* deste ponto e formam o que chamamos de espaço tangente. Para visualizar isto, primeiramente começamos escrevendo a direção do vetor tangente a uma curva $C: u^1(t), u^2(t)$ na superfície S , dado por

$$\mathbf{x}' = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{du^1} \frac{du^1}{dt} + \frac{d\mathbf{x}}{du^2} \frac{du^2}{dt} = \mathbf{x}_1 u'^1 + \mathbf{x}_2 u'^2. \quad (3.35)$$

Podemos observar que o vetor $\mathbf{x}'$ é uma combinação linear dos vetores tangentes $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ e desde que o ponto P seja um ponto regular de S , ou seja, $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ sejam linearmente independentes, então estes vetores formam o *plano tangente* $E(P)$ ao ponto P .

3.2.3 Primeira forma fundamental (PFF). Conceito de geometria Riemanniana

A grandiosidade da geometria diferencial está na possibilidade de realizar medidas, seja de ângulos, comprimentos de arcos, áreas de superfície, entre outros. Para realizações destas medidas é necessário a definição de produto escalar em uma superfície curva. Para isso vamos determinar o elemento de arco de uma dada curva imersa em S . A partir das equações (3.5) e (3.35) podemos encontrar o elemento de comprimento de arco

$$\begin{aligned} ds^2 &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1 du^1 + \mathbf{x}_2 du^2) \cdot (\mathbf{x}_1 du^1 + \mathbf{x}_2 du^2) = \\ &= \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1 (du^1)^2 + 2\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 du^1 du^2 + \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_2 (du^2)^2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Escrevendo

$$\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{x}_\beta = g_{\alpha\beta} \quad \text{onde} \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (3.37)$$

Então ficamos com

$$ds^2 = g_{11} (du^1)^2 + 2g_{12} du^1 du^2 + g_{22} (du^2)^2. \quad (3.38)$$

Utilizando a convenção do somatório de Einstein podemos reescrever na forma

$$ds^2 = g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta. \quad (3.39)$$

Em muitas notações podemos encontrar $g_{11} = E$, $g_{12} = g_{21} = F$ e $g_{22} = G$. Esta forma quadrática é a chamada *primeira forma fundamental* (PFF), com ela temos o que chamamos de *métrica* da superfície, ou seja, a "assinatura" da superfície. O coeficiente $g_{\alpha\beta}$ é chamado de *tensor métrico*. Uma métrica definida por um infinitesimal quadrático é chamada de *métrica Riemanniana* e sua geometria correspondente é a *geometria Riemanniana*, o espaço onde ela esta inserida é o *espaço Riemanniano*.

3.2.4 Vetor Normal à superfície

Vimos que em um ponto regular de uma superfície S podemos associar dois vetores linearmente independentes, $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$, e destes vetores formamos o plano tangente $E(P)$. Assim, com estes vetores podemos gerar um terceiro vetor ortogonal a eles, chamado de *vetor unitário*

normal dado por

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2}{|\mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2|}. \quad (3.40)$$

Utilizando a seguinte identidade:

$$|\mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2|^2 = |\mathbf{x}_1|^2 |\mathbf{x}_2|^2 \sin^2 \alpha = g_{11} g_{22} (1 - \cos^2 \alpha) = g_{11} g_{22} - (\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2)^2 = g, \quad (3.41)$$

encontramos

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2}{\sqrt{g}}, \quad (3.42)$$

onde g é o discriminante da PFF dado por

$$g = \det(g_{\alpha\beta}) = g_{11} g_{22} - (g_{12})^2. \quad (3.43)$$

É possível verificar que a partir da soma dos determinantes ao quadrado da equação (3.32) o discriminante g , em pontos regulares da superfície, é positivo definido (Apêndice C).

3.2.5 Como medir ângulo e área em uma superfície

Considerando duas curvas $C: u^\alpha = h^\alpha(t)$ e $C^*: u^\alpha = h^{\alpha*}(t)$ ($\alpha = 1, 2$), interceptadas no ponto P de uma superfície S . O vetor tangente de cada curva pode ser escrito como

$$\mathbf{v} = \frac{d}{dt} \{ \mathbf{x}(h^1(t), h^2(t)) \} = \mathbf{x}_\alpha h'^\alpha \quad e \quad \mathbf{v}^* = \frac{d}{dt} \{ \mathbf{x}(h^{1*}(t), h^{2*}(t)) \} = \mathbf{x}_\beta h'^{\beta*}. \quad (3.44)$$

O ângulo entre os dois vetores é dado por

$$\cos \gamma = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}^*}{|\mathbf{v}| |\mathbf{v}^*|} = \frac{g_{\alpha\beta} h'^\alpha h'^{\beta*}}{\sqrt{(g_{\mu\nu} h'^\mu h'^\nu)} \sqrt{(g_{\sigma\tau} h'^{\sigma*} h'^{\tau*})}} \quad (3.45)$$

Para os vetores $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ tem-se a mesma relação da equação 3.45, pois são tangentes às curvas u^1 e u^2 . Indicando ω como o ângulo de interseção destas curvas, temos

$$\cos \omega = \frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2}{|\mathbf{x}_1| |\mathbf{x}_2|} = \frac{g_{12}}{\sqrt{(g_{11} g_{22})}}. \quad (3.46)$$

Pela equação 3.46 observa-se que um sistema de coordenadas em S é ortogonal se, e somente se, em qualquer ponto de S , $g_{12} = 0$. Com isto, podemos medir ângulos em superfícies.

Para descrição da área de uma superfície podemos imaginar uma certa porção H de uma superfície arbitrária $S : \mathbf{x}(u^1, u^2)$, a área $A(H)$ é definida a partir da integral dupla

$$A(H) = \iint_U \sqrt{g} du^1 du^2, \quad (3.47)$$

onde U é o domínio no plano $u^1 u^2$ correspondente a H . Além disso, temos o elemento de área de H dado pela expressão

$$dA = \sqrt{g} du^1 du^2. \quad (3.48)$$

A equação (3.48) é de grande importância para o presente trabalho, tendo em vista que normalização de uma função de onda em uma superfície depende da expressão do elemento de área.

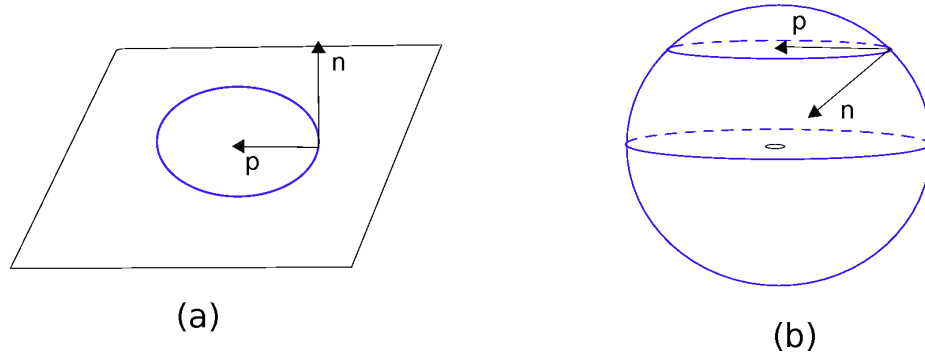
3.3 Segunda Forma Fundamental (SFF)

Em qualquer ponto de uma curva C de S podemos descrever o vetor unitário $\mathbf{n}$ e em $E(P)$ temos contido o vetor normal principal $\mathbf{p}$. O ângulo entre estes dois vetores depende do formado da curva C e da superfície S nas vizinhanças do ponto considerado. Na Figura 3.5(a) podemos observar um círculo descrito em um plano, este tipo de curva é chamada de curva plana, ou seja, são curvas imersas em um plano. Nesta situação, como estas curvas não sofrem torção, os vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ são ortogonais. Para o caso da Figura 3.5(b) temos um círculo imerso na superfície de uma esfera, como o vetor $\mathbf{n}$ é perpendicular a superfície, ou seja, direciona-se para o centro da esfera, o ângulo entre $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ não é mais $\frac{\pi}{2}$ e, portanto, os vetores não são ortogonais.

Agora, considerando uma superfície arbitrária que possua uma curva também arbitrária do tipo $C: u^1 = u^1(s)$ e $u^2 = u^2(s)$. Sendo γ o ângulo entre os vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$, como os vetores são unitários temos

$$\cos \gamma = \mathbf{p} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.49)$$

Figura 3.5 – (a) Vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ em uma curva plana. (b) Vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{p}$ de um círculo C de uma esfera S .



Fonte: Autor

Como $\mathbf{p} = \frac{\ddot{\mathbf{x}}}{\kappa}$ podemos reescrever a equação 3.49 da forma,

$$\kappa \cos \gamma = \ddot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.50)$$

Definindo uma notação do tipo

$$\mathbf{x}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^\alpha} \quad e \quad \mathbf{x}_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial u^\alpha \partial u^\beta}. \quad (3.51)$$

Podemos aplicar mudança de variáveis e reescrever $\ddot{\mathbf{x}}$ no seguinte formato

$$\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{\alpha\beta} \dot{u}^\alpha \dot{u}^\beta + \mathbf{x}_\alpha \ddot{u}^\alpha. \quad (3.52)$$

Sabendo que $\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{n} = 0$, por serem ortogonais, então podemos escrever a seguinte expressão

$$\ddot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{x}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}) \dot{u}^\alpha \dot{u}^\beta. \quad (3.53)$$

Introduzindo a notação

$$b_{\alpha\beta} = \mathbf{x}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.54)$$

Reescrevendo a equação 3.53,

$$\ddot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n} = b_{\alpha\beta} \frac{du^\alpha}{ds} \frac{du^\beta}{ds}. \quad (3.55)$$

A partir disso, denomina-se como *Segunda Forma Fundamental* (SFF) a seguinte expressão:

$$b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta = b_{11} (du^1)^2 + 2b_{12} du^1 du^2 + b_{22} (du^2)^2. \quad (3.56)$$

A SFF nos dá a informação da curvatura de uma superfície, isto ficará mais claro quando formos defini-la. Em muitas literaturas pode ser encontrado $b_{11} = L$, $b_{12} = b_{21} = M$ e $b_{22} = N$

3.3.1 Invariância sob transformações

Ao descrever a PFF encontramos $ds^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}$, ou seja, a PFF é invariante com respeito a qualquer transformação de coordenadas. No caso da SFF não podemos afirmar nada, até o momento, sobre invariância sob transformações. Para isso vamos usar a mesma relação em que $\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{n} = 0$ e derivar esta expressão com respeito a u^β , assim temos

$$\left(\frac{\partial}{\partial u^\beta} \mathbf{x}_\alpha \right) \cdot \mathbf{n} + \mathbf{x}_\alpha \cdot \left(\frac{\partial}{\partial u^\beta} \mathbf{n} \right) = 0 \quad (3.57)$$

Definindo $\mathbf{n}_\beta \equiv \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial u^\beta}$ e utilizando-se disto para reescrever a equação 3.57, encontramos

$$\mathbf{x}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta. \quad (3.58)$$

Com isto podemos redefinir a notação 3.54 e consequentemente reescrever a SFF no seguinte formato,

$$b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta = -\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\beta du^\alpha du^\beta = -\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^\alpha} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial u^\beta} du^\alpha du^\beta = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{n} \quad (3.59)$$

Com isto, podemos, dizer que a SFF também é invariante com respeito a uma transformação de coordenadas. Portanto, a PFF e a SFF são intrínsecas da geometria estudada, ou seja, não dependem da escolha das coordenadas.

3.3.2 Interpretação de curvatura em superfícies

Na seção 3.1.3 discutiu-se a curvatura de uma curva em dado ponto, para o caso de superfícies podemos também associar uma curvatura e isto é possível pelo fato de termos curvas imersas na superfície.

Primeiramente, para a descrição da curvatura vamos imaginar um dado parâmetro t qualquer de uma curva C . Assim podemos escrever,

$$\dot{u}^\alpha = \frac{du^\alpha}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{u^{\alpha'}}{s'}. \quad (3.60)$$

Aplicando a equação 3.55 na equação 3.50 e utilizando a equação anterior encontramos,

$$\kappa \cos \gamma = b_{\alpha\beta} \frac{u^{\alpha'}}{s'} \frac{u^{\beta'}}{s'}, \quad (3.61)$$

onde

$$\frac{1}{(s')^2} = \frac{dt}{ds} \frac{dt}{ds} = \frac{dt^2}{g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta} = \frac{1}{g_{\alpha\beta} u^{\alpha'} u^{\beta'}} \quad (3.62)$$

Portanto, podemos escrever a equação 3.61 como

$$\kappa \cos \gamma = \frac{b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta}{g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta}. \quad (3.63)$$

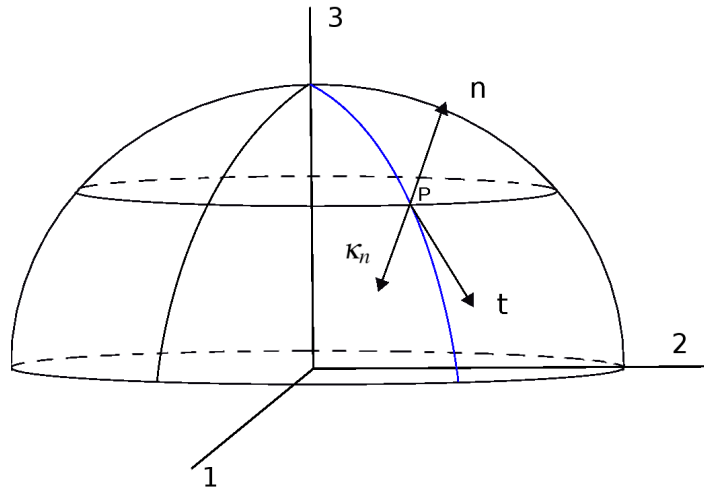
Considerando curvas cuja tangente possua a mesma direção o ângulo γ é fixo, consequentemente, $\kappa \cos \gamma$ é uma constante. Assim, podemos escrever situações como esta da seguinte forma:

$$\kappa \cos \gamma = \kappa_n \quad (3.64)$$

onde κ_n é uma constante. Para o caso onde $\gamma = 0$ temos $\kappa = \kappa_n$ e para $\gamma = \pi$ então $\kappa = -\kappa_n$. Assim, temos $|\kappa_n|$ como sendo a *curvatura* da curva que faz interseção com a superfície S e o plano que passa pela tangente à curva C em P e a normal de S em P . Curvas deste tipo são chamadas de *seções normais* de S (Figura 3.6). Assim, κ_n depende apenas das direções da tangente às seções normais em P e o chamamos de *curvatura normal* de S em P . Introduzindo o *vetor curvatura normal*

$$\mathbf{k}_n = \kappa_n \mathbf{n} \quad (3.65)$$

Figura 3.6 – Vetor curvatura normal



Fonte: Autor

Também existe a possibilidade de $\kappa_n = 0$, estas direções são chamadas de *direções assintóticas* e curvas que possuem tangentes com direções assintóticas são chamadas de *curvas assintóticas*. Nestas condições, a equação 3.63 se resumir a

$$b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta = 0, \quad (3.66)$$

sendo uma equação diferencial de curvas assintóticas.

Porém, excluindo a possibilidade de $\kappa_n = 0$ podemos escrever o seu recíproco,

$$k_n = \frac{1}{R}, \quad (3.67)$$

onde $|R|$ é o raio de curvatura da seção normal do ponto em consideração. A partir da equação 3.12 podemos também escrever

$$\rho = R \cos \gamma. \quad (3.68)$$

3.3.3 Curvatura Gaussiana e Média

Até agora tratamos κ_n como uma função da direção da tangente às seções normais em P. Nada foi dito sobre a possibilidade de direções onde κ_n possua valores extremos (no caso, máximo e mínimo). Para determinação destas direções vamos reescrever a equação 3.63 na

forma

$$\kappa_n - \frac{b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta}{g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta} = 0, \quad (3.69)$$

multiplicando ambos os lados por $g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta$,

$$\kappa_n g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta - b_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta = 0, \quad (3.70)$$

definindo $l^\gamma = du^\gamma$, ficamos com

$$(b_{\alpha\beta} - \kappa_n g_{\alpha\beta}) l^\alpha l^\beta = 0. \quad (3.71)$$

Denominando na equação anterior $a_{\alpha\beta} = b_{\alpha\beta} - \kappa_n g_{\alpha\beta}$ e derivando ambos os lados em termos de l^γ encontramos

$$\frac{\partial}{\partial l^\gamma} (a_{\alpha\beta} l^\alpha l^\beta) = a_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial l^\gamma} (l^\alpha l^\beta) = a_{\alpha\beta} (l^\alpha \delta_\gamma^\beta + l^\beta \delta_\gamma^\alpha) = (a_{\alpha\gamma} + a_{\gamma\alpha}) l^\alpha = 0. \quad (3.72)$$

Desde que $b_{\alpha\beta}$ e $g_{\alpha\beta}$ sejam simétricos então $a_{\gamma\alpha} = a_{\alpha\gamma}$ e assim a equação 3.72 se reduz a $a_{\alpha\gamma} l^\alpha = 0$. Assim, encontramos

$$(b_{\alpha\gamma} - \kappa_n g_{\alpha\gamma}) l^\alpha = 0. \quad (3.73)$$

Na equação 3.73 atribuindo um valor para γ (1 ou 2), substituindo a igualdade de κ_n da equação 3.63 e depois multiplicando ambos os lado por $g_{\alpha\beta} du^\alpha du^\beta$ encontramos

$$\begin{vmatrix} g_{1\alpha} du^\alpha & b_{1\beta} du^\beta \\ g_{2\alpha} du^\alpha & b_{2\beta} du^\beta \end{vmatrix} = 0 \quad (3.74)$$

ou,

$$\begin{vmatrix} (du^2)^2 & -du^1 du^2 & (du^1)^2 \\ g_{11} & g_{12} & g_{22} \\ b_{11} & b_{12} & b_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.75)$$

As raízes da equação 3.74 determinam a direção onde κ_n possui valores extremos. Estas direções são chamadas de *direções de curvatura* e os valores correspondentes de κ_n são chamados de *curvatura normal principal* de S em P , definindo-as por κ_1 e κ_2 .

Podemos também, a partir da equação 3.73, extrair uma expressão analítica para as curvaturas principais. Multiplicando a equação pelo tensor métrico $g^{\beta\gamma}$ e utilizando suas propriedades tensoriais (Apendice E), nos encontramos

$$b_\alpha{}^\beta du^\alpha - \kappa_n du^\beta = 0 \quad (\beta = 1, 2), \quad (3.76)$$

consequentemente, resolvendo o sistema de equações ficamos com

$$\kappa_n^2 - b_\alpha{}^\alpha \kappa_n + \det(b_\alpha{}^\beta) = 0, \quad (3.77)$$

e desde que $\det(b_\alpha{}^\beta) = \frac{b}{g}$, podemos reescrever

$$\kappa_n^2 - b_\alpha{}^\alpha \kappa_n + \frac{b}{g} = 0. \quad (3.78)$$

Consequentemente as curvaturas principais são as raízes da equação (3.78).

A partir de conceitos fundamentais de equação de segundo grau, podemos introduzir duas definições analisando a equação (3.78), que são elas:

- *Curvatura Gaussiana*: dada pelo produto das curvaturas principais

$$K = \kappa_1 \kappa_2 = \frac{b}{g} \quad (3.79)$$

- *Curvatura Média*: dada pela média aritmética das curvaturas principais

$$M = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2) = \frac{1}{2}b_{\alpha\beta}g^{\alpha\beta} \quad (3.80)$$

POTENCIAL GEOMÉTRICO QUÂNTICO

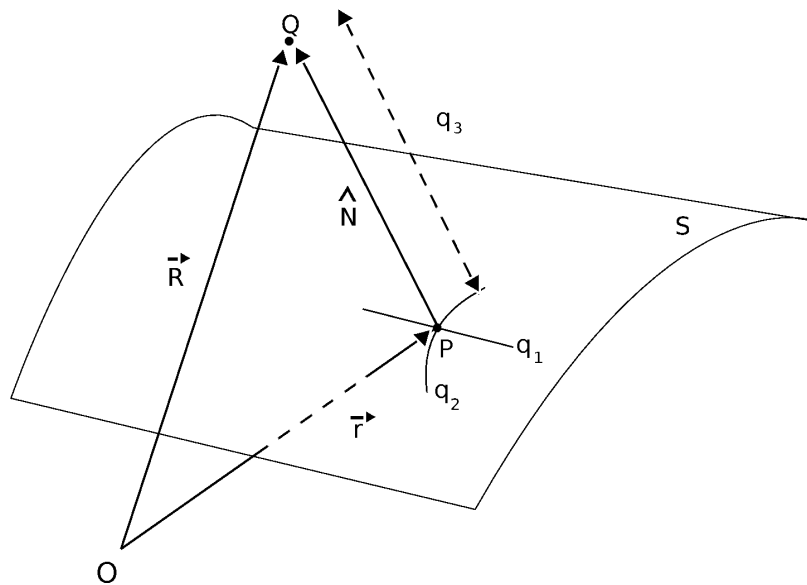
Classicamente, ao descrever o movimento de uma partícula podemos abordar o problema de duas maneiras. Uma delas é a abordagem Newtoniana, onde uma partícula mesmo livre está sujeita a forças espaciais. Outra abordagem é a Lagrangeana, onde os vínculos da partícula devem ser inseridos desde o início nas coordenadas generalizadas e no desenvolver dos cálculos não há nenhuma descrição do espaço no qual a partícula se encontra. Quanticamente, temos a possibilidade de utilizar a equação de Schrödinger, que descreve o movimento de uma partícula quântica não relativística e as limitações são descritas por um potencial externo. No entanto, se escolhermos uma abordagem Lagrangeana não precisaremos nos preocupar com o espaço externo, mas mesmo assim é necessário um processo de quantização (COSTA, 1981). Assim sendo, o propósito é analisar quais informações conseguimos extrair da equação de Schrödinger ao analisar uma partícula limitada por uma superfície arbitrária.

Imaginemos uma partícula de massa m vinculada por uma superfície S sob uma parametrização do tipo $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2)$, ou seja, o vetor posição do ponto P de S (Figura 4.1). Um certo ponto Q na vizinhança da superfície S pode ser parametrizado como

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

onde $\hat{\mathbf{N}}$ é o vetor unitário normal de S e q_3 é o valor absoluto da distância entre S e o ponto Q .

Figura 4.1 – Superfície S



Fonte: Autor

A equação de Schrödinger para uma partícula sob efeitos de um potencial é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (4.2)$$

Para a análise em questão, nossa limitação será o potencial espacial $V = V_\lambda(q_3)$, onde λ é um parâmetro de "compressão" que mede a intensidade do potencial. Este potencial tem a função de limitar a posição da partícula na vizinhança da superfície S . Sendo assim, temos

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda = \begin{cases} 0, & q_3 = 0 \\ \infty, & q_3 \neq 0 \end{cases}. \quad (4.3)$$

Para a adequação da equação (4.2) ao problema, o Laplaciano precisa ser escrito em coordenadas curvilíneas generalizadas, dado por

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \right), \quad (4.4)$$

onde g é o discriminante do tensor métrico, que ainda precisa ser definido para o ponto Q .

4.1 O tensor métrico

Podemos escrever o tensor métrico nas vizinhanças de S da seguinte forma,

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_j}, \quad (4.5)$$

e a partir da equação (4.1), a derivada parcial do vetor $\mathbf{R}$ é dado por,

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \frac{\partial}{\partial q_i} \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \frac{\partial}{\partial q_i} \hat{\mathbf{N}}(q_1, q_2). \quad (4.6)$$

Logo, devemos descobrir o significado de $\frac{\partial}{\partial q_i} \hat{\mathbf{N}}$. Desde de que as derivadas do *vetor normal unitário* estejam sob o plano normal podemos utilizar a equação de Weingarten que, para dada

parametrização $\mathbf{r} = \mathbf{r}(u, v)$ temos,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial u} = \frac{g_{12}b_{12} - g_{22}b_{11}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} + \frac{g_{12}b_{11} - g_{11}b_{12}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial v} = \frac{g_{12}b_{12} - g_{22}b_{12}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} + \frac{g_{12}b_{12} - g_{11}b_{22}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}. \quad (4.8)$$

Aplicando a equação de Weingarten para nosso problema, encontramos

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{N}}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \vec{\mathbf{r}}}{\partial q_j}, \quad (4.9)$$

onde $\alpha_{11} = \frac{1}{g}(g_{12}b_{21} - g_{22}b_{11})$, $\alpha_{12} = \frac{1}{g}(g_{21}b_{11} - g_{11}b_{21})$, $\alpha_{21} = \frac{1}{g}(g_{12}b_{22} - g_{22}b_{12})$ e $\alpha_{22} = \frac{1}{g}(g_{12}b_{21} - g_{22}b_{11})$. Com isto, podemos reescrever a equação (4.6),

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \frac{\partial}{\partial q_i} \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}, \quad (4.10)$$

podemos escrever de forma simplificada,

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \mathbf{R} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + \alpha_{ij} q_3) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}. \quad (4.11)$$

Utilizando deste resultado na equação (4.5) adquirimos a seguinte expressão para o tensor métrico:

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} + q_3 \sum \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j} \right) \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} + q_3 \sum \alpha_{ji} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \right) = \\ &= g_{ij} + q_3 \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \sum \alpha_{ji} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \sum \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j} \right) + q_3^2 \left(\sum \alpha_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j} \sum \alpha_{ji} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i} \right) = \\ &= g_{ij} + q_3 [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} + q_3 [\alpha g \alpha^T]_{ij}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Observamos que $G_{i3} = G_{3i} = 0$ para $(i=1,2)$ e $G_{33} = 1$. Com isto, já podemos escrever a equação de Schrödinger, dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (4.13)$$

Podemos separar o Laplaciano em duas partes. A primeira parte corresponde aos índices do somatório ($i, j = 1, 2$), ou seja, termos de superfície indicados por $D(q_1, q_2, q_3)$. Já a segunda parte é dada pelos índices ($i = j = 3$), a parte normal à superfície. Reescrevendo a equação (4.13) com estas considerações, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}D(q_1, q_2, q_3)\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \ln(\sqrt{G}) \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (4.14)$$

A partir do momento que consideramos a existência de uma função de onda de superfície, com dependência apenas das coordenadas q_1 e q_2 , podemos introduzir uma nova função de onda $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2)\chi_n(q_3)$, onde t simboliza a parte tangente e n a normal (COSTA, 1981). A transformação de $\psi \rightarrow \chi$ induz uma normalização da função de onda sobre o volume dV , que pode ser escrito a partir do tensor métrico nas vizinhanças da superfície, sendo assim escrevemos

$$dV = \sqrt{G}dq_1dq_2dq_3 = \sqrt{\det(G_{ij})}dq_1dq_2dq_3 = f(q_1, q_2, q_3)dAq_3, \quad (4.15)$$

onde dA , o elemento infinitesimal de área, é dado por $dA = \sqrt{g}dq_1dq_2$ e a função $f(q_1, q_2, q_3)$ é escrita como

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + Tr(\alpha_{ij})q_3 + det(\alpha_{ij})q_3^2. \quad (4.16)$$

Assim encontramos função de onda normalizada,

$$\psi(q_1, q_2, q_3) = \frac{\chi(q_1, q_2, q_3)}{\sqrt{f(q_1, q_2, q_3)}}. \quad (4.17)$$

. Utilizando a normalização (4.17) na equação (4.14), resultamos em

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}D\left(\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial q_3^2} \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \ln(\sqrt{G}) \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) \right] + V_\lambda(q_3) \frac{\chi}{\sqrt{f}} = \\ & = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

resolvendo esta equação encontramos

$$\begin{aligned} \sqrt{f} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} D \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial q_3} f \right)^2 - 2f \frac{\partial^2}{\partial q_3^2} f \right] \chi \right\} + V_\lambda(q_3) \chi = \quad (4.19) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi \end{aligned}$$

Analisando os efeitos do potencial $V_\lambda(q_3)$, para o limite de $\lambda \rightarrow \infty$ a função de onda "enxerga" duas barreiras de potencial de ambos os lados da superfície (COSTA, 1981). Assim podemos fazer $q_3 \rightarrow 0$ nos coeficientes da equação acima e isto implica nas seguintes aproximações:

$$\begin{aligned} f &\simeq 1 \\ G_{ij} &\simeq g_{ij} \\ \left(\frac{\partial}{\partial q_3} f \right)^2 &= [Tr(\alpha_{ij}) + 2det(\alpha_{ij})q_3]^2 \simeq [Tr(\alpha_{ij})]^2. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Reescrevendo a equação de Shcrödinger com estas aproximações e compreendendo que $\frac{\partial^2}{\partial q_3^2} f = 2det(\alpha_{ij})$, encontramos

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij}) \right)^2 - det(\alpha_{ij}) \right] \chi + \quad (4.21) \\ + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi. \end{aligned}$$

Utilizando a consideração de que $\chi = \chi_t(q_1, q_2, t) \times \chi_n(q_3, t)$ nos leva as seguintes equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi_n = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_n, \quad (4.22)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij}) \right)^2 - det(\alpha_{ij}) \right] \chi_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_t. \quad (4.23)$$

A equação (4.22) é simplesmente uma equação de Schrödinger unidimensional para um certa partícula limitada pelo potencial transversal $V_\lambda(q_3)$. Por outro lado a equação (4.23) nos oferece uma informação bem curiosa. O potencial desta equação é puramente geométrico, ou seja, $V_s =$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) \right)^2 - \det(\alpha_{ij}) \right]$ é o potencial gerado devido a presença da superfície. Portanto, podemos dizer que a superfície por si só produz um potencial sob a partícula.

Analisando com detalhes o potencial de superfície escrito na equação (4.23), o $\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij})$ é dado por

$$\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) = \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{22}) = \frac{1}{2g} [-b_{11}g_{22} - b_{22}g_{11} + 2b_{12}g_{12}]. \quad (4.24)$$

Podemos observar a igualdade com a equação (3.80), ou seja, este é o potencial gerado pela curvatura média da superfície.

Agora resolvendo o $\det(\alpha_{ij})$, encontramos

$$\det(\alpha_{ij}) = \alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21} = \frac{1}{g}(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}) = \frac{1}{g}\det(b_{ij}) = \frac{b}{g}. \quad (4.25)$$

Esta expressão é idêntica a equação (3.79), sendo assim, este elemento do potencial de superfície é dado pela curvatura Gaussiana da superfície. Portanto, podemos reescrever a equação (4.23) como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g}(g^1)_{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} [M^2 - K] \chi_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_t. \quad (4.26)$$

O procedimento imposto por da Costa de $q_3 \rightarrow 0$ gerou muita discussão nos últimos 30 anos, chegando a concluir que sob certas condições de fronteira o processo do da Costa é inválido, exceto para superfícies com curvatura média constante. Uma aproximação mais realista consistiria em considerar uma fita fina, ou seja, um objeto geométrico volumétrico e não uma superfície bidimensional. Com esta consideração o limite tomado é para a espessura d da fita ($d \rightarrow 0$) o que resulta na permanência da coordenada q_3 que ao proceder com o limite de $q_3 \rightarrow 0$, retorna às conclusões de da Costa (WANG; ZONG, 2016).

Para o caso onde existe a presença de campo elétrico e/ou magnético em superfície curva é necessário realizar algumas alterações na descrição feita neste capítulo. Por exemplo, é necessário escrever a equação de Shcrödinger na forma covariante,

$$i\hbar D_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} G^{ij} D_i D_j \psi, \quad (4.27)$$

onde as derivadas covariantes são dadas por $D_j = \nabla_j - \frac{iQ}{\hbar}A_j$, $D_0 = \partial_t - \frac{iQA_0}{\hbar}$. Dado que Q é a carga, $\mathbf{A}$ o potencial vetor e, definindo o potencial escalar, $A_0 = -V$.

Realizando o mesmo processo de confinamento da partícula em uma superfície curva apresentado neste capítulo, encontra-se por fim, a equação que descreve a dinâmica na superfície curva submetida a campos elétricos e magnéticos, dada por (FERRARI; CUOGHI, 2008):

$$\begin{aligned} i\hbar D_0 \chi = & \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{g}} \partial_a \left(\sqrt{g} g^{ab} \partial_b \chi \right) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{a}} \partial_a \left(\sqrt{g} g^{ab} A_b \right) \chi + 2iQ\hbar g^{ab} A_a \partial_b \chi + \right. \\ & + Q^2 \left(g^{ab} A_a A_b + (A_3)^2 \right) \chi - \hbar^2 (\partial_3)^2 \chi + iQ\hbar (\partial_3 A_3) \chi + 2iQ\hbar A_3 (\partial_3 \chi) - \\ & \left. - \hbar^2 \left(\left[\frac{1}{2} Tr(\alpha) \right]^2 - det(\alpha) \right) \chi \right] + V_\lambda(q_3) \chi. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Na equação anterior observa-se que o potencial vetor, que carrega a informação dos campos, não está acoplado com o potencial geométrico. Sendo assim, a aplicação de um campo elétrico e magnético não altera a estrutura do potencial gerado pela superfície (FERRARI; CUOGHI, 2008).

4.2 Aplicações do potencial geométrico quântico

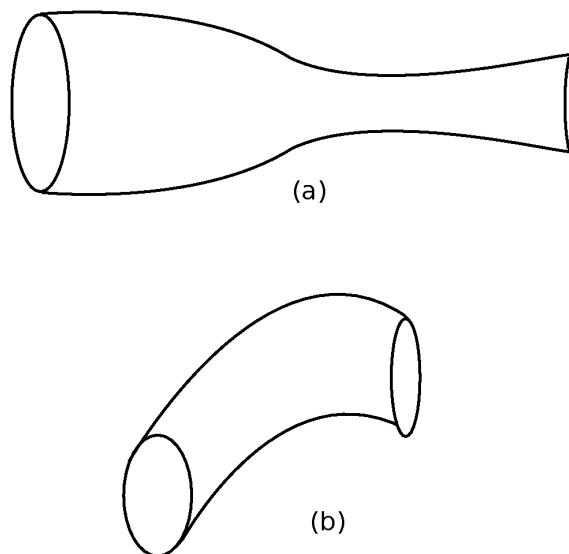
Uma simples busca no Google Acadêmico no artigo "Quantum mechanics of a constrained particle" Physical Review A, APS, v.23, no qual é extraído o potencial geométrico quântico (ou potencial do da Costa) encontramos mais de 400 citações, desta forma, observamos uma onda de trabalhos envolvendo potenciais de superfície. Estes potenciais podem resultar em diversas propriedades físicas muito interessantes.

Como o interesse está em estruturas bidimensionais, um sistema recorrente na literatura é o gás de elétrons bidimensional. Este sistema por um método experimental "epitaxial lift-off" pode ser curvado, no qual um gás de elétron plano é depositado em um tubo de vidro induzindo uma curvatura (LORKE; BÖHM; WEGSCHEIDER, 2003).

Ao estudar efeitos da topologia no transporte eletrônico através de junções cilíndricas e superfícies cilíndricas curvadas, conforme Figura 4.2, é observado que para uma estrutura do tipo da Figura 4.2(a) para valores onde o comprimento da conexão (tamanho da região de afunilamento) é pequeno tem-se um coeficiente de transmissão mais baixo. Por outro lado, para uma estrutura conforme a Figura 4.2(b) observa-se que o coeficiente de transmissão é alto para altos valores do raio de curvatura, o que é de se esperar, tendo em vista que quanto

maior o raio de curvatura mais uma curva tende a uma reta e uma superfície tende a um plano (MARCHI et al., 2005). Além disso, técnicas experimentais para produção de superfícies curvas cilíndricas não está longe da realidade. Tendo em vista que utilizando a técnica de crescimento por cobertura MBE (Molecular-beam-epitaxy) é possível produzir nanotubos de InGaAs/GaAs com diâmetro interno de aproximadamente 2nm (PRINZ et al., 2000).

Figura 4.2 – (a) Junção cilíndrica de raios diferentes; (b) Superfície cilíndrica curvada



Fonte: Autor

O arcabouço matemático da geometria diferencial está presente também na gravitação, onde temos o conceito de *buraco de minhoca*, que representa uma solução das equações de campo de Einstein, a geometria bidimensional equivalente a um buraco de minhoca é denominada catenoide, uma superfície mínima¹. Ao analisar o potencial geométrico efetivo, para uma partícula no estado fundamental, observa-se que o catenoide é hábil para uma completa transmissão de uma partícula quântica através da superfície, ao contrário de um buraco de minhoca tridimensional. Para energias diferentes do estado fundamental é observado um potencial de poço duplo invertido (DANDOLOFF; SAXENA; JENSEN, 2010).

Uma estrutura muito frequente em sistemas biológicos é o helicóide, por exemplo, algumas estruturas de proteína apresentam, esse formato, no próprio DNA, em fibras de celulose, entre outros. Na matéria condensada, temos cristais líquidos que também apresentam esta estrutura. Ao analisar o potencial geométrico efetivo de uma fita helicoidal, ou seja, uma estrutura bidimensional helicoidal, é observado comportamentos diferentes dependendo no número quântico.

¹ Chama-se de superfície mínima aquela superfície que possua a menor área dentre as outras superfícies de mesma fronteira. Também caracterizada por ter curvatura média nula (MOREIRA, 2014).

tico de momento angular. Para $\ell = 0$ tem um potencial quântico anti-centrífugo, direcionando os elétrons para o eixo central da fita helicoidal, o contrario acontece para $\ell \neq 0$ (ATANASOV; DANDOLOFF; SAXENA, 2009).

Algumas rotas de síntese de nanomateriais de silício são limitados a estrutura cúbica-diamante. Porém, é possível a produção de nanocones de silício e Germânio com estrutura hexagonal-diamante (CAO et al., 2005). A presença de um campo magnético nestas superfícies cônicas nos leva a uma Hamiltoniana com a presença do momento canonicamente conjugado, para este caso é a soma do momento com o produto da carga da partícula e o potencial vetor. Como o campo está aplicado em uma superfície curva, no caso o cone, temos na Hamiltoniana o acréscimo do potencial geométrico. Com a energia do sistema é possível calcular os níveis de Landau e, consequentemente, a condutividade Hall do sistema (POUX et al., 2014).

Não é apenas com elétrons que efeitos de curvatura de superfície aparecem, um análogo óptico do potencial geométrico quântico é observado em fótons confinados em filmes finos de sílica (SZAMEIT et al., 2010). Sendo assim, efeitos puramente geométricos estão presentes na natureza numa perspectiva quântica.

MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA

Em Física do Estado Sólido, mais especificamente na Física de Semicondutores, o transporte eletrônico acontece em uma rede cristalina e o elétron está sob efeitos do potencial da rede. Por efeitos deste potencial a massa medida do elétron não é sua massa no vácuo mas o que chamamos de *massa efetiva*. Sendo uma propriedade tensorial, a massa efetiva tem liberdade para assumir direções arbitrárias, inclusive negativas, ou seja, uma anisotropia de massa. Por outro lado, no vácuo a massa do elétron é uma propriedade escalar.

Para melhor compreensão sobre a massa efetiva anisotrópica é necessário entender alguns conceitos, que serão apresentados nas seções a seguir.

5.1 Uma breve descrição da Teoria de Bandas

A descrição de um elétron em um sólido não é uma atividade trivial, tendo em vista a necessidade de combinar o potencial eletrostático de todos os íons da rede e todos os outros elétrons (RAZEGHI, 2009). A característica básica de um sólido é a periodicidade de sua rede, ou seja, possuir o formato de uma estrutura cristalina, onde os átomos podem ser agrupados em células unitárias e estas, por sua vez, obedecerem certas simetrias, como rotações e translações. A periodicidade da rede implica em potenciais periódicos, que de certa forma simplifica o entendimento de características dos elétrons, como espectro de energia, função de onda, massa, etc.

As funções de onda do elétron nos sólidos não são ondas planas como no caso de elétrons livres, para este caso, as funções de onda possuem um termo no qual está inserido a periodicidade da rede, estas funções são chamadas de *funções de onda de Bloch*, podendo ser expressadas como:

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \cdot u(\vec{k}, \vec{r}) \quad (5.1)$$

onde $\vec{k}$ é o vetor de onda da partícula, $\vec{r}$ a posição e $u(\vec{k}, \vec{r})$ é a função que contém a informação da periodicidade da rede, de tal forma que $u(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{k}, \vec{r})$. Combinando a equação (5.1) com a função de periodicidade anterior encontramos:

$$\psi(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \psi(\vec{k}, \vec{r}). \quad (5.2)$$

Para o caso de uma rede unidimensional podemos chamar a periodicidade da rede de d , o que nos leva a concluir que a função de onda é a mesma para valores de k no qual sejam múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{d}$. Isto leva-nos a restringir o intervalo de valores permitidos de k para $-\frac{\pi}{d} < k \leq \frac{\pi}{d}$.

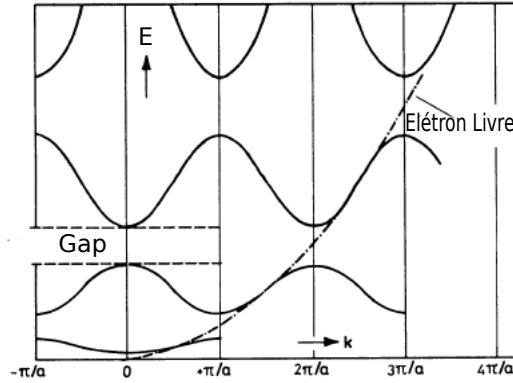
Para o caso de cristais finitos são descritos condições periódicas de fronteiras para as funções de Bloch. Nestas condições assume-se uma cadeia linear de N átomos com período d . Assim sendo, podemos aplicar as mesmas condições periódicas de fronteira, o que nos leva a concluir que o vetor de onda deve ser escrito na forma $k = \frac{2\pi n}{Nd}$. Todo este arcabouço descrevendo a periodicidade da função de onda do elétron em uma rede cristalina é chamado de *teorema de Bloch*.

Em acréscimo ao teorema de Bloch, uma simplificação do potencial periódico usado frequentemente é o *modelo de Kroning-Penney* (RAZEGHI, 2009). Neste modelo, os portadores de carga estão sob efeito de uma força ao passar por um átomo, em seguida a interação com o campo do átomo vizinho faz com que ele sofra uma "desaceleração". Sendo assim, pode-se aproximar o potencial da rede como um arranjo de poços de potencial (SEEGER, 2013). A descrição deste modelo se desencadeia na solução da equação de Schrödinger, onde a energia do sistema é uma função do vetor de onda $E(\vec{k})$. Porém, existem certas regiões onde estas funções não são reais e são chamadas de *bandas de energia proibidas* ou *gap*, ou do inglês *band gap*. A energia do band gap é definida como a diferença entre duas *bandas de energia permitidas*.

Para o caso de um elétron livre, sua energia é dada por $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, que por sua vez, sua representação é uma parábola. Por outro lado, para elétrons em um cristal a parábola é substituída por curvas senoidais separadas por descontinuidades na energia em $k = n\frac{\pi}{a}$, para n inteiros (SEEGER, 2013). Um exemplo de um diagrama de bandas pode ser visto na Figura (5.1).

Em geral, tem-se o interesse pelas bandas de condução e valência, pelo fato de podermos definir características de materiais a partir delas. Nos materiais condutores, não temos a presença de band gap, as bandas de condução e valência são interligadas. Para o caso dos isolantes, o band gap é largo, ou seja, é necessário altas energias para o elétron estar na banda de condução em materiais isolantes. O meio termo é o que se chama de *semicondutores*. Estes materiais são caracterizados por band gap pequeno, assim, em baixas energias é possível fazer o elétron sair da banda de valência e estar na banda de condução, em alguns materiais semicondutores isso acontece em temperatura ambiente (KITTEL, 2005).

Figura 5.1 – Bandas de energia



Fonte: SEEGER (2013)

5.2 Dinâmica de elétrons em um cristal: Massa Efetiva

A dinâmica do elétron em um cristal pode ser descrita ao considerarmos os elétrons como ondas de matéria. Assim sendo, podemos assumir uma frequência ω , um número de onda k e uma velocidade de propagação v_g , chamada de *velocidade de grupo*, dada por:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (5.3)$$

Escrevendo a relação de energia e frequência, $E = \hbar\omega$, e substituindo na equação anterior, encontramos:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (5.4)$$

Os átomos do cristal exercem no elétron uma força externa, consequentemente, temos a indução de um trabalho mecânico, que pode ser expresso da seguinte maneira, $dE = F dx = F v_g dt$. Sendo assim, podemos expressar a força da seguinte maneira:

$$F = \frac{1}{v_g} \frac{dE}{dt} = \frac{1}{v_g} \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt}. \quad (5.5)$$

Utilizando a equação (5.4), a equação anterior pode ser reescrita como $F = \hbar \frac{dk}{dt}$.

Como estamos descrevendo uma força podemos associar uma aceleração, basta derivar a equação (5.4):

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{d(\hbar k)}{dt}. \quad (5.6)$$

A partir da equação (5.5) podemos substituir o termo $\frac{d(\hbar k)}{dt}$ na equação anterior, resultando na expressão:

$$F = \left(\frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \right) \frac{dv_g}{dt}. \quad (5.7)$$

A equação (5.7) recorda a segunda lei de Newton, onde o termo em parênteses está associado a massa. Sendo assim, podemos escrever

$$m^* = \left(\frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \right), \quad (5.8)$$

onde m^* é chamado de *massa efetiva*.

A equação (5.7) mostra que, em Mecânica Quântica, quando uma força externa age sobre o elétron, leis clássicas ainda podem ser consideradas, desde que a massa do elétron seja alterada por uma massa efetiva (RAZEGHI, 2009). Além disso, a massa efetiva expressa uma relação entre a estrutura de bandas do sólido e a dinâmica do elétron neste sólido, tendo em vista, que a massa efetiva nada mais é que a curvatura da banda de energia do sólido.

A descrição anterior feita de massa efetiva levou-se em conta uma rede unidimensional, o caso mais generalizado pode ser escrito em notação tensorial como:

$$M_{ij}^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right). \quad (5.9)$$

Além da massa efetiva quebrar o paradigma de que massa é uma propriedade exclusivamente escalar, tem-se ainda a possibilidade dela ser negativa, desde que a direção do tensor da expressão anterior seja negativa. O que significa que a direção de propagação do elétron é oposta a direção no qual a força externa é aplicada sobre ele (RAZEGHI, 2009). Alguns materiais como HgTe e algumas ligas de HgCdTe possuem estrutura de banda invertida em certa direção do vetor de onda $\vec{k}$, ou seja, em certa direção de $\vec{k}$ a banda de valência está acima da banda de condução, conseqüentemente, massa efetiva negativa (SILVEIRINHA; ENGHETA, 2012).

5.3 Metamateriais eletrônicos

A descrição de diversos fenômenos físicos são regidos por constantes, como a velocidade da luz no vácuo, a constante universal dos gases, a constante de Boltzman, entre outras. Porém, em geral, tomamos estas constantes como inalteráveis e qualquer modificação feita sobre elas pode ser visto com maus olhos.

Alguns materiais artificiais excitados por ondas eletromagnéticas possuem propriedades muito diferentes dos materiais usuais. As constantes de permissividade elétrica ϵ e permeabilidade magnética μ possuem valores negativos. Estes materiais são chamados de *metamateriais* (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2007). Além disso, existe a possibilidade da produção de metamaterias 3D no qual apresentam o índice de refração negativo. Em alguns destes metamateriais esta propriedade é observada para frequências de micro-ondas mas também existem estruturas no qual a propriedade é encontrada em frequências óticas (VALENTINE et al., 2008).

5.3.1 Parâmetros análogos entre elétrons em uma rede cristalina e ondas eletromagnéticas

A equação de Schrödinger para elétrons se movendo em uma rede cristalina, pode ser escrita no seguinte formato:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{M} \right]^{ij} \partial_i \partial_j \psi + V \psi = E \psi, \quad (5.10)$$

Por outro lado, o campo elétrico (E) e magnético (B), tal como o potencial vetor eletromagnético (A), podem ser descritos pela equação de Helmholtz:

$$\nabla^2 \mathbf{F} + k^2 \mathbf{F} = 0, \quad (5.11)$$

onde $\mathbf{F} = \mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ ou $\mathbf{A}$.

Pode ser visto que $\left[\frac{1}{M} \right]^{ij} \psi$ satisfaz perfeitamente a equação (5.11), como qualquer outra componente de $\mathbf{F}$, desde que k seja substituído pelo numero de onda da onda de matéria, $k = \frac{[2M^{ij}(E-V)]^{\frac{1}{2}}}{\hbar}$. Tendo em vista que $\left[\frac{1}{M} \right]^{ij}$ é um vetor e a função de onda ψ é uma função escalar (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2013).

Sendo assim, pode ser dito que existe uma analogia entre a equação de Schrödinger e a equação de Helmholtz. Sob outra perspectiva, uma onda eletromagnética, propagando na

direção z de um plano cartesiano, com frequência ω e componentes de campo E_x e H_y podem ser descritas pelas equações de Maxwell em forma matricial (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2007):

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\omega\mu \\ i\omega\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Também em notação matricial, a equação de Schrödinger, para um elétron em uma rede cristalina, independente do tempo unidimensional pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{im^*}{\hbar} \\ \frac{2i(E-V)}{\hbar} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

onde $\varphi = \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz}$.

A similaridade entre essas equação sugere que as constantes ε e μ são parâmetros análogos a massa efetiva do elétron (m^*) e a diferença $(E - V)$. Sendo assim, podemos fazer uso desta analogia para descrever *metamateriais eletrônicos*, ou seja, materiais onde a massa efetiva do elétron de condução possui valor negativo.

GÁS DE ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES BIDIMENSIONAL CURVO COM MASSA EFETIVA ANISOTRÓPICA

Na seção 4 foi descrita a dinâmica de uma partícula quântica em uma superfície curva imersa no $\mathbb{R}^3$. Ao realizar o mesmo procedimento, porém considerando uma massa efetiva anisotrópica na direção perpendicular à superfície, ou seja, apresentar isotropia de massa na superfície, a equação de Schrödinger que descreve a dinâmica na superfície é dada por:

$$\hbar \partial_t \chi_s = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_a \left(\sqrt{g} g^{ab} \partial_b \chi_s \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\left(\frac{1}{2} M \right)^2 - K \right] \chi_s, \quad (6.1)$$

onde m_1 e m_2 é a massa efetiva, respectivamente, na superfície e perpendicular à superfície, χ_s representa a função de onda do elétron na superfície.

Por métodos de simulação, para uma heteroestrutura de AlN/GaN/AlN, ao analisar a dinâmica na junção, a massa efetiva do AlN é cerca de $0.4m_0$, onde m_0 é a massa do elétron no vácuo, ao passo que o GaN pode ter massa efetiva negativa, sob efeito de campo elétrico de $5 \times 10^7 \frac{V}{m}$ possui uma massa efetiva de $-0.02m_0$ (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2007). Estes valores de massa efetiva serão utilizados no presente trabalho para a produção de gráficos.

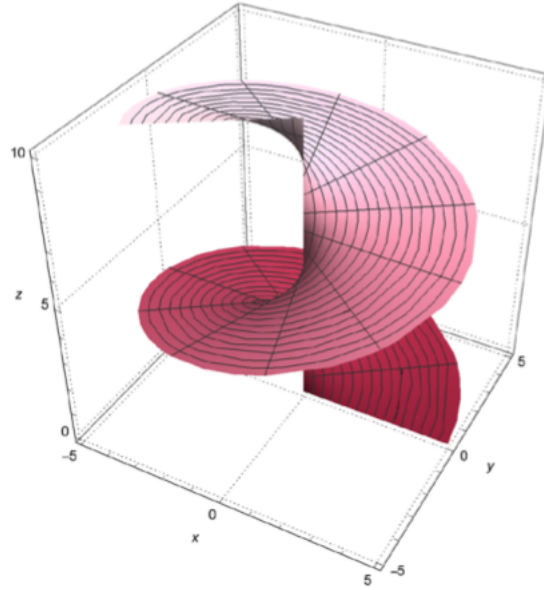
A partir disso, podemos analisar a dinâmica de elétrons em diversas superfícies. A descrição deste modelo e algumas aplicações podem ser encontrado no trabalho "A Curved Noninteracting 2D Electron Gas with Anisotropic Mass", Annalen der Physik, p. 1800112 (2018) realizado pelo autor com colaboração do Prof. Dr. Cleverson Filgueiras, Prof. Dr. Moises Rojas e Prof. Dr. Edilberto O. Silva. Estas aplicações serão apresentadas nas seções a seguir.

6.1 Uma partícula quântica em um helicóide

Um helicóide pode ser visto na Figura (6.1) e parametrizado pelo conjunto de equações:

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos(\omega z), \\ y &= \rho \sin(\omega z), \\ z &= z, \end{aligned} \quad (6.2)$$

Figura 6.1 – Helicoide



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

onde $\omega = 2\pi S$, sendo S o número de voltas por unidade de comprimento do helicoide, ρ é a distância radial a partir do eixo z . A partir da equação (6.3), podemos escrever a métrica

$$ds^2 = d\rho^2 + (1 + \omega^2 \rho^2) dz^2. \quad (6.3)$$

Onde as componentes da métrica são:

$$\begin{aligned} g_{\rho\rho} &= 1, \\ g_{zz} &= 1 + \omega^2 \rho^2, \\ g_{\rho z} &= g_{z\rho} = 0, \end{aligned} \quad (6.4)$$

Consequentemente, o determinante da métrica é dado por $g = (1 + \omega^2 \xi^2)$. O helicoide é uma superfície mínima, o que significa possuir curvatura média (M) igual a zero em todos os seus pontos (SILVA; SILVA, 2015). Sendo assim, a curvatura gaussiana é dada por:

$$K = \frac{b}{g} = \frac{1}{g} [\det(b_{ij})]^2 = -\frac{\omega^2}{(1 + \omega^2 \xi^2)}. \quad (6.5)$$

Portanto, o potencial geométrico quântico V_s é escrito da seguinte forma:

$$V_s = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\omega^2}{(1 + \omega^2 \xi^2)}. \quad (6.6)$$

A partir da equação (6.1), a equação de Schrödinger para uma partícula em um helicóide é dado por

$$i\hbar\chi_s = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{1}{a} \left(\partial_z \left(\frac{1}{a} \partial_z \chi_s \right) + \partial_\rho (a \partial_\rho \chi_s) \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\omega^2}{(1 + \omega^2 \rho^2)^2}, \quad (6.7)$$

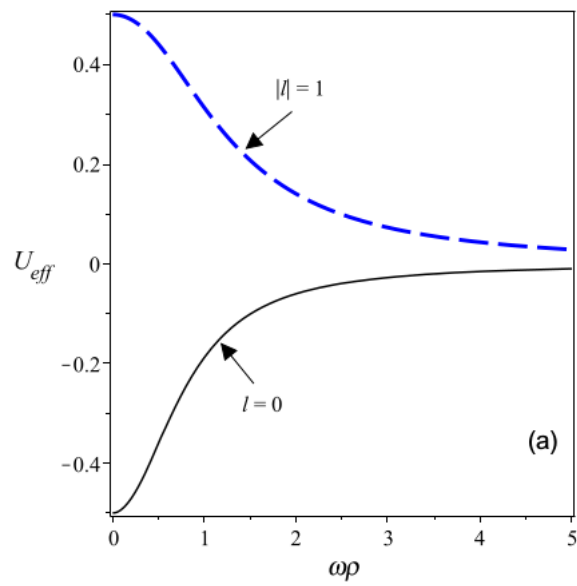
onde $a \equiv \sqrt{1 + \omega^2 \rho^2}$.

Considerando um ansatz do tipo $\chi_s = \exp(il\omega z)f(\rho)$, onde l é o número quântico orbital, e que a função de onda é normalizada com respeito ao infinitesimal de área $d\rho dz$, podemos substituir $\chi_s \rightarrow \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_s$. Aplicando estas considerações na equação (6.7), encontramos a Hamiltoniana de curvatura, dada por

$$H_{curv}\chi_s = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\chi_s}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{l^2\omega^2}{1 + \omega^2\rho^2} - \frac{\omega^2}{2(1 + \omega^2\rho^2)^2} \left(-1 + \frac{\omega^2\rho^2}{2} + \frac{2m_1}{m_2} \right) \right] \chi_s. \quad (6.8)$$

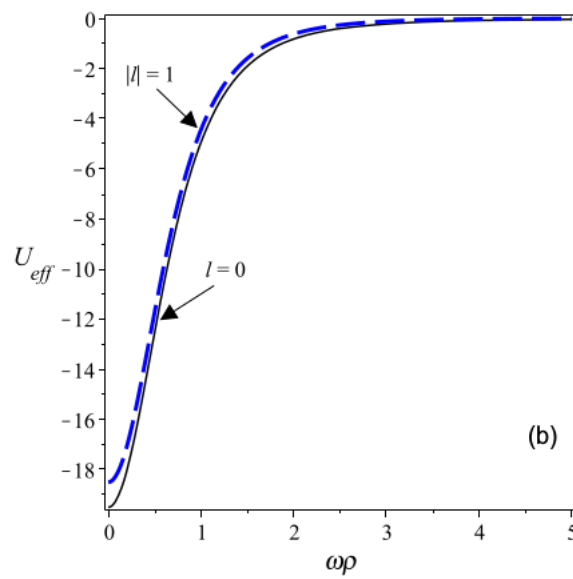
A partir da equação anterior é possível analisar os efeitos do potencial geométrico efetivo. Para o caso de um material isotrópico ($m_1 = m_2$), Figura (6.2), observa-se que ω , para valores de $l \neq 0$ desloca os elétrons para a borda externa do helicóide, o contrário acontece para $l = 0$, criando um campo elétrico efetivo (ATANASOV; DANDOLOFF; SAXENA, 2009). Na figura (6.3), para valores de $m_1 \neq m_2 > 0$ a separação de carga não acontece. Neste caso, para um helicóide infinito os elétrons são repelidos para $\rho = 0$ e no caso de um helicóide finito, temos a presença de um poço quântico, onde neste contexto pode ser interpretado como a estrutura de um ponto quântico e fenômenos relativos a absorção e emissão ótica podem ser explorados neste sistema. No entanto, para valores de $m_1 > 0$ e $m_2 < 0$, Figura (6.4), é formado uma barreira de potencial e todos os elétrons são repelidos para a borda externa do helicóide.

Figura 6.2 – Material isotrópico ($m_1 = m_2$)

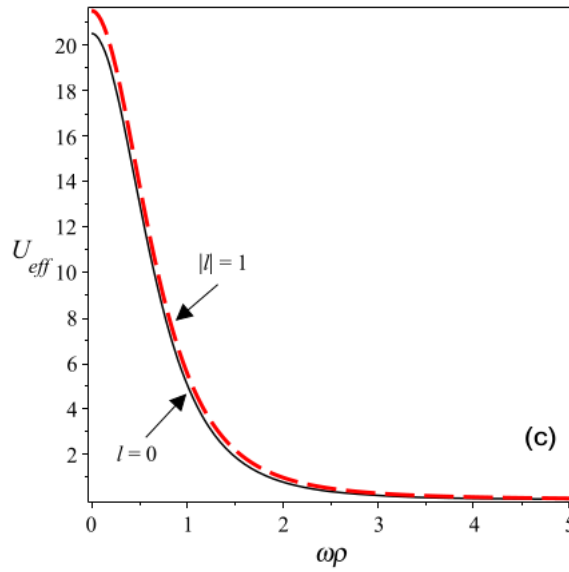


Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Figura 6.3 – Material anisotrópico ($m_1 \neq m_2 > 0$)



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Figura 6.4 – Metamaterial ($m_1 > 0, m_2 < 0$)

Fonte: SOUZA, et al. (2018)

6.2 Propriedades de transmissão em uma junção cilíndrica isotrópica/anisotrópica

Vamos propor uma dada junção cilíndrica, ou seja, dois cilindros conectados por suas seções retas, onde o elétron está confinado na superfície do cilindro. O primeiro cilindro não possui anisotropia de massa efetiva, já no segundo cilindro propomos uma anisotropia de massa efetiva na componente perpendicular a superfície do cilindro. Podemos descrever o movimento do elétron na junção pelos conceitos propostos por da Costa.

Dada a parametrização do cilindro:

$$\mathbf{r}(\theta, z) = (R \cos \theta, R \sin \theta, z). \quad (6.9)$$

A métrica do sistema é escrita como:

$$ds^2 = R^2 d\theta^2 + dz^2. \quad (6.10)$$

Assim podemos escrever a Hamiltoniana para o primeiro cilindro, que vamos denominar sua massa efetiva por m_1 ,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 + V_{curv}, \quad (6.11)$$

onde o laplaciano é dado por,

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j}) = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(R \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial z} \left(R \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (6.12)$$

e o potencial de curvatura é dado por

$$V_{curv} = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{4R^2}. \quad (6.13)$$

Por fim, a equação de Schrödinger fica na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{4R^2} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (6.14)$$

Aplicando a normalização da função de onda $\psi \rightarrow \frac{\psi}{R}$, chegamos a seguinte equação,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{4R^2} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (6.15)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{4R^2} \psi = E \psi. \quad (6.16)$$

Sendo assim, podemos observar que a energia potencial que o elétron está vinculado é descrito por,

$$V_{m_1}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{4R^2}. \quad (6.17)$$

Realizando o mesmo procedimento para o segundo cilindro, porém considerando uma anisotropia de massa para o termo do potencial de superfície, a equação de Schrödinger independente do tempo fica com o seguinte formato:

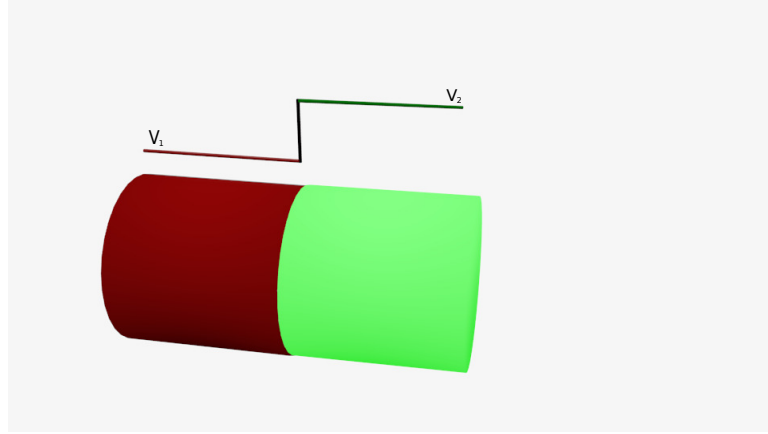
$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{2|m_2|} \frac{1}{4R^2} \psi = E \psi. \quad (6.18)$$

Como m_2 é negativo, a energia potencial é dada por:

$$V_{m_2}(R) = +\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{1}{4R^2}. \quad (6.19)$$

Observa-se, quando o elétron se desloca do primeiro cilindro para o segundo cilindro ele "enxerga" uma barreira de potencial, conforme a figura (6.5).

Figura 6.5 – Junção cilíndrica e seu potencial



Fonte: Autor

Se assumirmos um ansatz do tipo $\psi(\theta, z) = e^{iL_\theta \theta} \varphi_1(z)$ para a função de onda da seção do cilindro correspondente a m_1 , a equação (6.16) resulta no seguinte formato:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_1(z) + q_-^2 \varphi_1(z) = 0, \quad (6.20)$$

onde q_- é dado por

$$q_- = \sqrt{-\frac{1}{4R^2} - \frac{L_\theta^2}{R^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E} = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{2m_1 ER^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}} = \frac{1}{R} \sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}}, \quad (6.21)$$

onde $L_\theta \equiv 0$

Analogamente, podemos assumir um ansatz do tipo $\psi(\theta, z) = e^{iL_\theta \theta} \varphi_2(z)$ para a função de onda da seção do cilindro correspondente a m_2 , assim a equação (6.18) fica com o seguinte formato:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_2(z) + q_+^2 \varphi_2(z) = 0, \quad (6.22)$$

onde q_+ é dado por,

$$q_+ = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} E + \frac{m_1}{|m_2|} \frac{1}{4R^2} - \frac{L_\theta^2}{R^2}} = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{2m_1 ER^2}{\hbar^2} + \frac{m_1}{|m_2|} \frac{1}{4}} = \frac{1}{R} \sqrt{\varepsilon + \frac{m_1}{|m_2|} \frac{1}{4}}, \quad (6.23)$$

onde $L_\theta \equiv 0$

Tomando como referência a interface da junção cilíndrica, concluímos que a dinâmica do elétron na junção pode ser descrita por:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_1(z) + q_-^2 \varphi_1(z) = 0 \rightarrow z < 0 \quad (6.24)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_2(z) + q_+^2 \varphi_2(z) = 0 \rightarrow z > 0 \quad (6.25)$$

6.2.1 Determinando e aplicando as condições de contorno

Para $z < 0$ a função de onda pode ser escrita da seguinte forma:

$$\varphi_1(z) = Ae^{ik_z^1 z} + Be^{-ik_z^1 z}. \quad (6.26)$$

Analogamente para $z > 0$, a função de onda é dada por:

$$\varphi_2(z) = Ce^{ik_z^2 z}. \quad (6.27)$$

No ponto onde $z = 0$, temos as seguintes condições:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad (6.28)$$

$$A + B = C \quad (6.29)$$

$$\frac{d}{dz} \varphi_1 \big|_{x=0} = \frac{d}{dz} \varphi_2 \big|_{x=0} \quad (6.30)$$

Pela a equação (6.30), temos que $C = \frac{k_z^1}{k_z^2}(A - B)$. Aplicando esta condição na equação (6.29), encontramos

$$B = \frac{k_z^1 - k_z^2}{k_z^1 + k_z^2} A. \quad (6.31)$$

Podemos utilizar a equação (6.31) para que o coeficiente C só dependa do coeficiente A , de tal forma que tenha o seguinte formato:

$$C = \frac{2k_z^1}{k_z^1 + k_z^2} A. \quad (6.32)$$

Aplicando a equação (6.26) na equação (6.24) encontramos $q_- = k_z^1$, analogamente temos que $q_+ = k_z^2$. Esta conclusão será importante na descrição dos coeficientes de reflexão e transmissão descritos a seguir, pois é utilizado os valores de A, B e C.

6.2.2 Coeficiente de reflexão e transmissão

O coeficiente de reflexão eletrônico é dado por:

$$R = \frac{\|B\|^2}{\|A\|^2} = \frac{(q_- - q_+)^2}{(q_- + q_+)^2} = \frac{\left[\frac{1}{R} \left(\sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}} - \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|}} \right) \right]^2}{\left[\frac{1}{R} \left(\sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}} + \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|}} \right) \right]^2}. \quad (6.33)$$

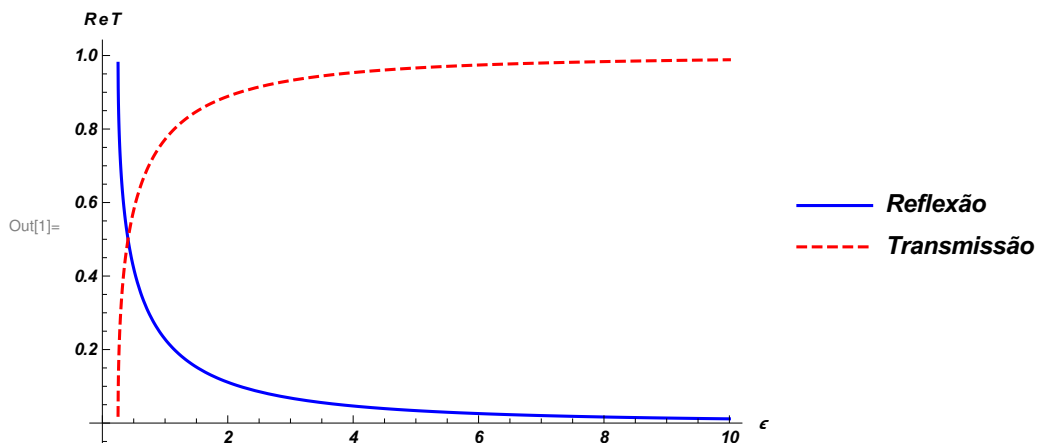
Por outro lado, o coeficiente de transmissão da junção cilíndrica é dado por:

$$T = \frac{v_2}{v_1} \frac{\|C\|^2}{\|A\|^2} \frac{\frac{p_2}{m}}{\frac{p_1}{m}} \frac{4q_-^2}{(q_- + q_+)^2} = \frac{\hbar k_z^2}{\hbar k_z^1} \frac{4q_-^2}{(q_- + q_+)^2} = \frac{4q_- q_+}{(q_- + q_+)^2} = \quad (6.34)$$

$$= \frac{4 \frac{1}{R^2} \sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}} \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|}}}{\left[\frac{1}{R} \left(\sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}} + \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|}} \right) \right]^2} = \frac{4 \sqrt{(\varepsilon - \frac{1}{4}) \left(\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|} \right)}}{\left(\sqrt{\varepsilon - \frac{1}{4}} + \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{4} \frac{m_1}{|m_2|}} \right)^2}. \quad (6.35)$$

Na figura (6.6) temos o gráfico dos coeficientes de transmissão e reflexão em função do parâmetro de energia ε , lembrando que $\varepsilon = \frac{2m_1 ER^2}{\hbar^2}$. Foram escolhido os valores de $m_1 = 0.4m_0$ e $m_1 = -0.02m_0$, onde m_0 é a massa do elétron no vácuo (DRAGOMAN; DRAGOMAN, 2007). Podemos observar que para altos valores de ε temos um aumento da transmissão eletrônica na junção, estes valores de ε podem significar grandes energias do elétron e/ou um cilindro com grande valor de raio e isto pode ser significativo para a aplicabilidade deste sistema.

Figura 6.6 – Reflexão e Transmissão eletrônica na junção cilíndrica



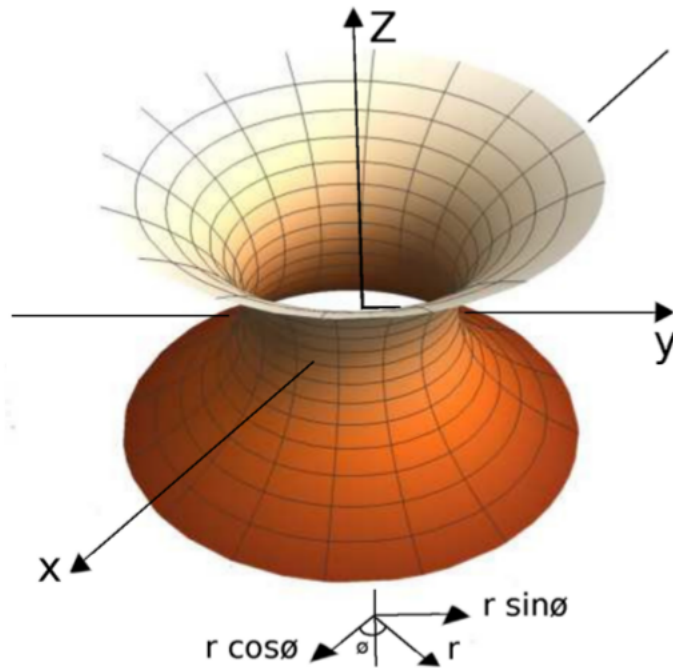
Fonte: Autor

6.3 Potencial geométrico induzido em um Catenoide

Um catenoide pode ser visto na Figura (6.7). Ele pode ser parametrizado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} x &= R \cosh\left(\frac{z}{R}\right) \cos \phi \\ y &= R \cosh\left(\frac{z}{R}\right) \sin \phi \\ z &= z \end{aligned} \quad (6.36)$$

Figura 6.7 – Catenoide com eixo ao longo do eixo z e raio do gargalo R



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

A métrica da superfície é dada por:

$$ds^2 = \cosh^2\left(\frac{z}{R}\right) dz^2 + R^2 \cosh^2\left(\frac{z}{R}\right) d\phi^2. \quad (6.37)$$

O catenoide é uma superfície mínima (SILVA; SILVA, 2015). Sendo assim, a curvatura média $M = 0$ e a curvatura gaussiana $K = -\frac{1}{R^2} \text{sech}^4\left(\frac{z}{R}\right)$. A partir disso, é possível escrever o potencial geométrico:

$$V_{\text{curv}} = -\frac{\hbar^2}{2|m_2|} (M^2 - K) = -\frac{1}{R^2} \text{sech}^4\left(\frac{z}{R}\right). \quad (6.38)$$

Para este caso, será considerado uma massa efetiva anisotrópica no caso mais geral possível, ou seja, anisotropia em todas as direções. Consequentemente, a equação de Schrödinger independente do tempo para o catenoide é

$$-\frac{\hbar^2}{2R^2 \cosh^2\left(\frac{z}{R}\right)} \left[\frac{R}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi + \frac{1}{m'_1 R} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi \right] - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{1}{R^2} \text{sech}^4\left(\frac{z}{R}\right) \psi = E \psi. \quad (6.39)$$

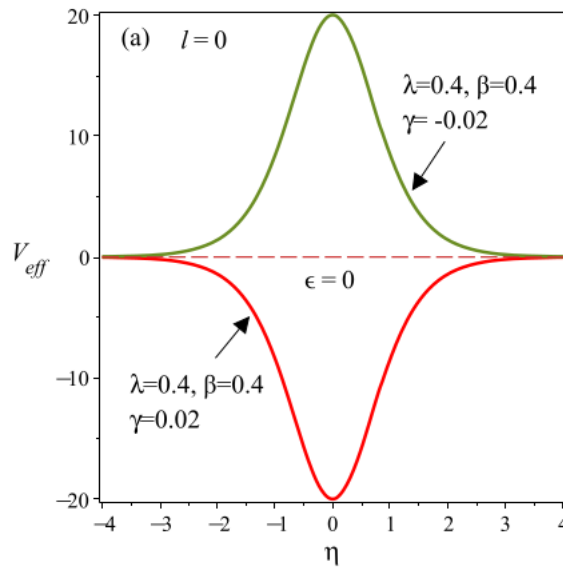
Para este caso geral, temos $m_1 = \lambda m_0$, $m'_1 = \beta m_0$ e $m_2 = \gamma m_0$. Assumindo um ansatz do tipo $\psi = e^{il\phi} \Phi(z)$ e definindo um parâmetro adimensional $\eta = \frac{z}{R}$ e um parâmetro de energia $\varepsilon = \frac{2m_0 R^2 E}{\hbar^2}$, a equação de Schrödinger se resume a

$$-\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \Phi(\eta) + V(\eta) \Phi(\eta) = 0, \quad (6.40)$$

onde o potencial geométrico induzido é dado por

$$V(\eta) = \frac{\lambda}{\beta} l^2 - \frac{\lambda}{\gamma} \text{sech}^2(\eta) - \lambda \varepsilon \cosh^2(\eta). \quad (6.41)$$

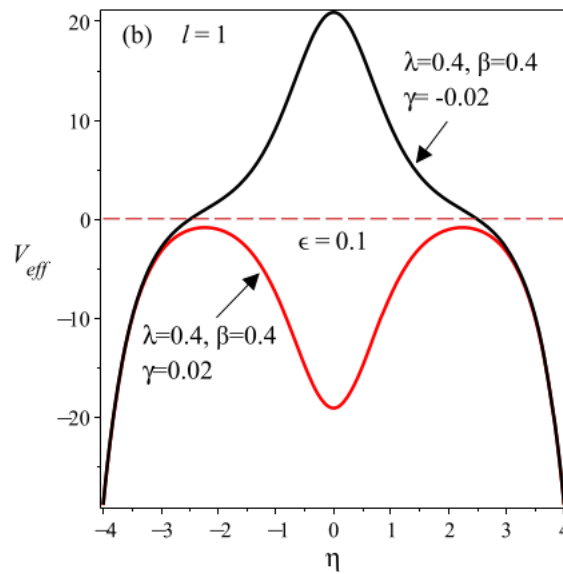
Figura 6.8 – Aparecimento de uma barreira de potencial para um metamaterial quando $\varepsilon = \ell = 0$



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Analisando a Figura (6.8), para $\varepsilon = 0$ (estado fundamental) e $\ell = 0$, quando temos uma anisotropia na massa efetiva o catenoide permite a transmissão de uma partícula quântica (curva vermelha). O contrário acontece para um metamaterial (massa efetiva transversal negativa), observa-se uma barreira de potencial (curva verde).

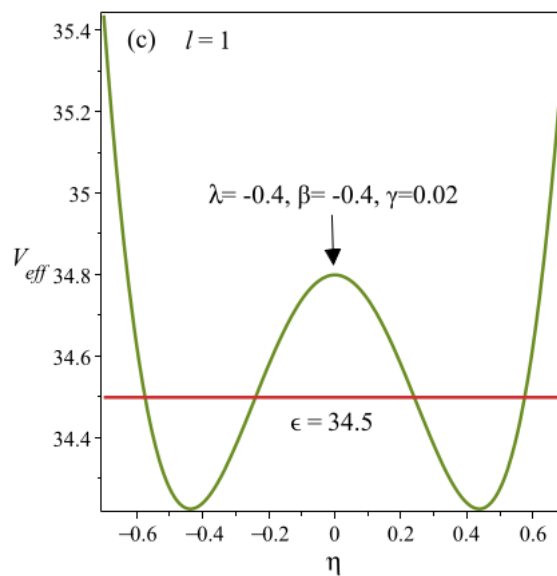
Figura 6.9 – Barreira de potencial para um metamaterial e um poço duplo invertido para um material ordinário anisotrópico



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Para um parâmetro de energia e número quântico, ambos diferentes de zero e positivos, $\varepsilon = 0.1$ e $\ell = 0$, observa-se, na Figura (6.9), um poço quântico invertido para um material anisotrópico ordinário (curva vermelha). Para um metamaterial, encontra-se a formação de uma barreira de potencial (curva preta).

Figura 6.10 – Um poço de potencial duplo é obtido quando as componentes da massa efetiva referente a superfície é negativa



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Um caso interessante é observado na Figura (6.10), para um para $\varepsilon = 34.5$ e $\ell = 1$, a aplicação da massa efetiva longitudinal negativa e transversal positiva, encontra-se um poço de potencial duplo. Este caso pode ser interpretado como um ponto quântico duplo ideal para o estudo de átomos artificiais de H_2 , tendo em vista que neste sistema temos o confinamento de dois elétrons (DIVINCENZO, 2005).

6.4 Efeito Hall Quântico em um Cone

Um breve relato sobre o efeito Hall quântico pode ser visto no Apêndice F.

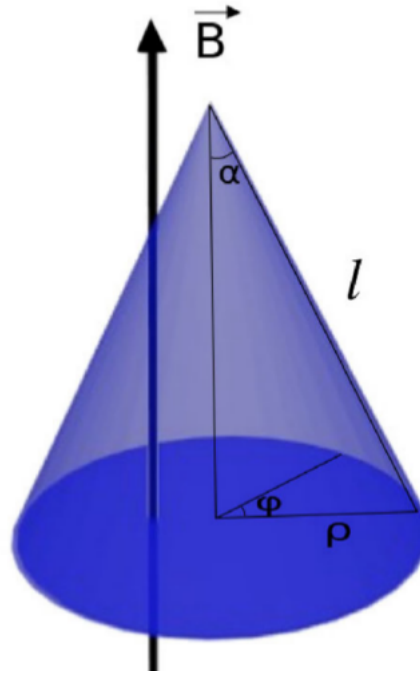
6.4.1 Níveis de Landau para uma partícula em um cone

Considerando as coordenadas l e φ de uma partícula confinada na superfície de um cone, podemos parametrizar da seguinte forma:

$$\begin{cases} x = l \sin \alpha \cos \varphi \\ y = l \sin \alpha \sin \varphi \\ z = l \cos \alpha \end{cases} \quad (6.42)$$

O sistema é configurado por uma seção de altura $l \cos \alpha$ com um campo magnético uniforme aplicado paralelo ao eixo do cone (Figura 6.11). Considerando α entre 0 e $\frac{\pi}{2}$, para $\frac{\pi}{2} < \alpha < \pi$ tem-se um cone invertido, onde parâmetros estão no intervalo $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 < l < +\infty$.

Figura 6.11 – Superfície de um cone sob efeito de um campo magnético uniforme



SOUZA, et al (2018)

Tendo em vista que $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ e também pode ser escrito como $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, o que leva a conclusão que $\vec{A} = \frac{1}{2} \rho B_z \hat{\phi} = \frac{1}{2} B_z l \sin \alpha \hat{\phi}$. A partir disso, podemos usar a equação (16), que descreve a dinâmica em uma superfície submetida a campo elétrico e/ou magnético, e escrever a dinâmica no cone sujeito ao campo magnético. Além disso, assumindo um ansatz do tipo $\Psi(l, \varphi) = e^{ij\varphi} \psi(l)$ para a função de onda no cone, onde $j = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial l} \left(l \frac{\partial}{\partial l} \right) - \frac{\frac{1}{4} + \frac{\mu^2}{\sin^2 \alpha}}{l^2} \right] \psi(l) + \frac{m_1 \omega^2 l^2}{2} \psi(l) = \Sigma \psi(l), \quad (6.43)$$

onde $\mu^2 = j^2 + \frac{\lambda(1-\sin^2 \alpha)}{4}$, com $\lambda = -1$ para um material ordinário isotrópico e $\lambda = -\frac{m_1}{m_2}$ para o caso anisotrópico. Além disso, temos $\omega = \frac{\omega_c}{2} \sin \alpha$, sendo $\omega_c = \frac{B_z e}{m_1}$ (frequência de cíclotron¹ e $\Sigma = E + \frac{\hbar \omega_c j}{2}$.

A equação diferencial (6.43) descreve um oscilador quântico bidimensional, onde a solução da função de onda é dada por (POUX et al., 2014):

$$\psi(l) = C |l|^2 e^{\left(-\frac{m\omega^2 l^2}{2}\right)} U\left(\frac{s}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\Sigma}{2\omega\hbar}, s + \frac{1}{2}, m\omega l^2\right). \quad (6.44)$$

¹ A deflexão causada pelo efeito Hall conduz a um movimento circular de onde pode-se descrever uma frequência angular, no caso, *frequência de cíclotron*. Cíclotron é um equipamento cujo seu funcionamento se consiste na aplicação do efeito Hall para acelerar partículas.

Onde

$$s = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\mu^2}{\sin^2 \alpha}} \right), \quad (6.45)$$

e C uma constante de normalização. A função $U(a, b, c)$ é uma série no qual soluciona a equação diferencial de Kummer e chamada de função de Kummer. Na equação (6.44) a série $U\left(\frac{s}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\Sigma}{2\omega}, s + \frac{1}{2}, m\omega l^2\right)$, pode ser escrita como um polinômio de grau n . Isto acontece quando (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972)

$$\frac{s}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\Sigma}{2\omega\hbar} = -n. \quad (6.46)$$

O que significa que $\Sigma = 2\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{4} \sqrt{1 + \frac{4\mu^2}{\sin^2 \alpha}} \right)$. Consequentemente, os níveis de Landau para elétrons em um cone são

$$E_{j,n} = \hbar\omega_c \sin \alpha \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \sqrt{1 + \frac{4\mu^2}{\sin^2 \alpha}} - \frac{j}{2\sin \alpha} \right). \quad (6.47)$$

6.4.2 Efeito Hall quântico em um cone

A condutividade Hall para um gás de elétrons bidimensional sob efeito de um campo magnético intenso e temperatura $T \sim 0$ é quantizado em múltiplos de $\frac{e^2}{h}$, dado por (STREDA, 1982)

$$\sigma_0 = -\frac{e^2}{h}n, \quad (6.48)$$

onde e é a carga do elétron e h a constante de Planck.

Para $T \neq 0$, considerando a condutividade Hall obtida em rede livre de impurezas, dado por (GUSYNIN; SHARAPOV, 2006)

$$\sigma_H(\mu, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sigma_H(\mu, 0) dE, \quad (6.49)$$

onde μ é o potencial químico, T a temperatura de f_0 é a distribuição de Fermi-Dirac²

² A distribuição de Fermi-Dirac é a estatística descreve os férmions, partículas de spin $\frac{1}{2}$, por exemplo o elétron.

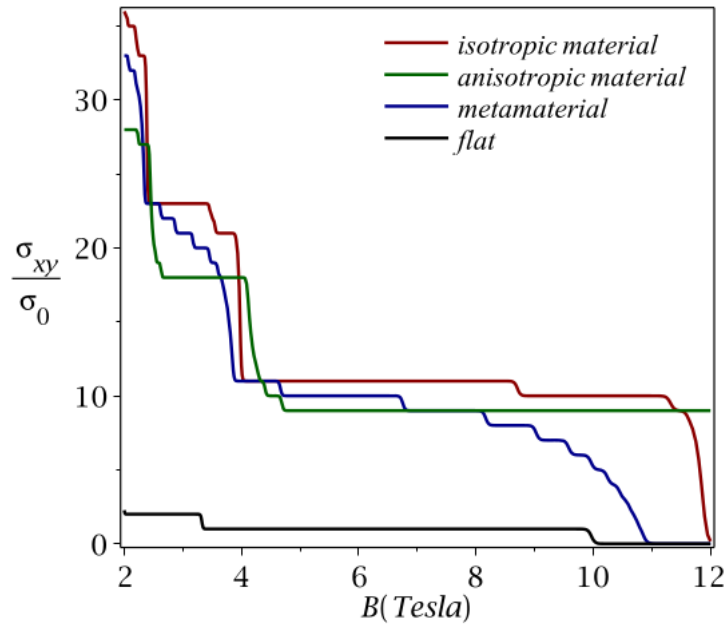
A distribuição de Fermi-Dirac é dada pela expressão:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{(E_n - \mu)}{k_B T}} + 1}, \quad (6.50)$$

onde k é a constante de Boltzmann e E_n os níveis de Landau.

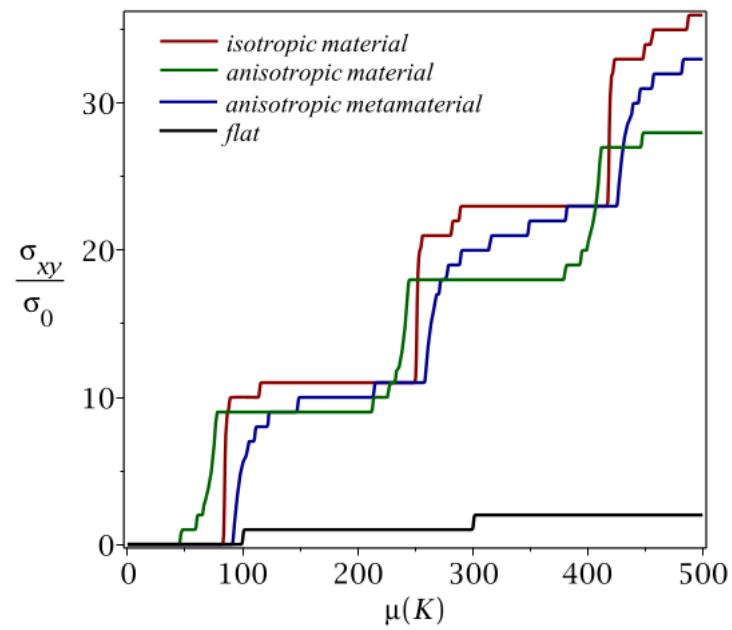
Pode ser observado a condutividade Hall versus o campo magnético na Figura (6.12), na Figura (6.13) temos a condutividade Hall versus o potencial químico. Os platôs são devido à quantização de Landau e para o caso de um material isotropico tem-se maior mobilidade dos elétrons comparado com uma amostra plana ("flat"). As curvas de metamateriais e materiais anisotrópicos estão entre as do material isotrópico. Além disso, na Figura (6.13), no caso de um material isotrópico, observa-se a formação de platôs para valores pequenos do potencial químico, o que não acontece para o caso *flat*. Assim sendo, a inclusão da curvatura no sistema aumenta a condutividade Hall em comparação a amostras planas.

Figura 6.12 – Condutividade Hall versus o campo magnético em um cone. Considerando $T=300K$.



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

Figura 6.13 – Condutividade Hall versus o potencial químico em um cone. Considerando $B=3T$.



Fonte: SOUZA, et al. (2018)

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi abordado uma variação do problema que envolve a dinâmica de uma partícula quântica confinada em uma superfície curva. A consideração da massa efetiva anisotrópica, para alguns casos, implica em alterações no potencial geométrico quântico, por exemplo, de atrativo ele passa a ser repulsivo. Isto tem impacto significativo comparado com sistemas isotrópicos, tendo como exemplo o caso da junção cilíndrica, onde uma anisotropia de massa efetiva acarretou na formação de uma barreira de potencial.

A ação de potenciais em sistemas quânticos tem grande utilidade em aplicações tecnológicas, como o confinamento do tipo ponto quântico de portadores de carga são utilizados na produção de televisões de altas definições de imagem. Desta forma, conforme o objetivo tecnológico, este trabalho apresentou uma proposta teórica onde a união da curvatura e anisotropia de massa efetiva pode alcançar resultados interessantes e distintos para o caso de massa efetiva isotrópica.

O estudo da dinâmica quântica em superfície curva é significativo até mesmo para entender o universo que nos envolve, tendo em vista que o próprio espaço-tempo é curvo. Sendo assim, como perspectiva futura, o estudo da propagação de fônons em um dado material curvo pode ser a descrição do análogo da propagação de fótons no espaço-tempo. Além disso, o refinamento do presente trabalho seria a consideração do gás de elétrons interagentes bidimensional curvo, no qual seria necessário a utilização do método estatístico de Monte Carlo.

REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. Handbook of mathematical functions, national bureau of standards, 1964, republished by dover publication. **Inc., New York**, 1972.
- ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R.; SAXENA, A. Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon. **Physical Review B**, APS, v. 79, n. 3, p. 033404, 2009.
- CAO, L. et al. Diamond-hexagonal semiconductor nanocones with controllable apex angle. **Journal of the American Chemical Society**, ACS Publications, v. 127, n. 40, p. 13782–13783, 2005.
- COSTA, R. D. Quantum mechanics of a constrained particle. **Physical Review A**, APS, v. 23, n. 4, p. 1982, 1981.
- DANDOLOFF, R.; SAXENA, A.; JENSEN, B. Geometry-induced potential on a two-dimensional section of a wormhole: Catenoid. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 1, p. 014102, 2010.
- DIVINCENZO, D. P. Double quantum dot as a quantum bit. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 309, n. 5744, p. 2173–2174, 2005.
- DRAGOMAN, D.; DRAGOMAN, M. Metamaterials for ballistic electrons. **Journal of applied physics**, AIP, v. 101, n. 10, p. 104316, 2007.
- DRAGOMAN, D.; DRAGOMAN, M. **Quantum-classical analogies**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- FERRARI, G.; CUOGHI, G. Schrödinger equation for a particle on a curved surface in an electric and magnetic field. **Physical review letters**, APS, v. 100, n. 23, p. 230403, 2008.
- FILGUEIRAS, C. Geometria, topologia e elasticidade: aplicações a membranas e outros sistemas bidimensionais. Universidade Federal da Paraíba, 2009.
- GOERBIG, M. O. Quantum hall effects. **arXiv preprint arXiv:0909.1998**, 2009.
- GUSYNIN, V.; SHARAPOV, S. Transport of dirac quasiparticles in graphene: Hall and optical conductivities. **Physical Review B**, APS, v. 73, n. 24, p. 245411, 2006.
- KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. 8. ed. [S.l.: s.n.], 2005.
- KREYSZIG, E. **Differential Geometry**. [S.l.]: Dover Publications, Inc, 1991.
- KRÖNER, E. The differential geometry of elementary point and line defects in bravais crystals. **International Journal of Theoretical Physics**, Springer, v. 29, n. 11, p. 1219–1237, 1990.
- LORKE, A.; BÖHM, S.; WEGSCHEIDER, W. Curved two-dimensional electron gases. **Superlattices and Microstructures**, Elsevier, v. 33, n. 5-6, p. 347–356, 2003.
- MARCHI, A. et al. Coherent electron transport in bent cylindrical surfaces. **Physical Review B**, APS, v. 72, n. 3, p. 035403, 2005.
- MOREIRA, N. C. **Superfície Mínima Discreta**. Dissertação (Mestrado) — UFES, 2014.
- NAKAHARA, M. **Geometry, topology and physics**. [S.l.]: CRC Press, 2003.

- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica: Mecânica**. [S.l.]: Editora Blucher, 2018. v. 1.
- POUX, A. et al. Landau levels, self-adjoint extensions and hall conductivity on a cone. **The European Physical Journal Plus**, Springer, v. 129, n. 5, p. 100, 2014.
- PRINZ, V. Y. et al. Free-standing and overgrown ingaas/gaas nanotubes, nanohelices and their arrays. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 6, n. 1-4, p. 828–831, 2000.
- RAZEGHI, M. **Fundamentals of solid state engineering**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.
- SCHUSTER, P. C.; JAFFE, R. Quantum mechanics on manifolds embedded in euclidean space. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 307, n. 1, p. 132–143, 2003.
- SEEGER, K. **Semiconductor physics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- SILVA, L. N. da; SILVA, M. P. da. Uma introdução ao estudo das superfícies mínimas utilizando o geogebra. **Revista do Instituto GeoGebra Internacional de São Paulo. ISSN 2237-9657**, v. 3, n. 2, p. 120–131, 2015.
- SILVEIRINHA, M. G.; ENGHETA, N. Transformation electronics: Tailoring the effective mass of electrons. **Physical Review B**, APS, v. 86, n. 16, p. 161104, 2012.
- STREDA, P. Quantised hall effect in a two-dimensional periodic potential. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 15, n. 36, p. L1299, 1982.
- SZAMEIT, A. et al. Geometric potential and transport in photonic topological crystals. **Physical review letters**, APS, v. 104, n. 15, p. 150403, 2010.
- TIPLER, P. A.; MOSCA, G. **Física para cientistas e engenheiros. Vol. 2: eletricidade e magnetismo, óptica**. [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2000.
- VALENTINE, J. et al. Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index. **nature**, Nature Publishing Group, v. 455, n. 7211, p. 376, 2008.
- WANG, Y.-L.; ZONG, H.-S. Quantum particle confined to a thin-layer volume: Non-uniform convergence toward the curved surface. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 364, p. 68–78, 2016.

APÊNDICE A – Curvatura para um parâmetro generalizado t

Pela equação 3.10 podemos escrever

$$\dot{\mathbf{t}}(s) = \kappa \mathbf{p}(s), \quad (1)$$

fazendo o produto vetorial com $\mathbf{t}$ de ambos os lados temos

$$\mathbf{t} \times \dot{\mathbf{t}} = \dot{\mathbf{x}} \times \ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{t} \times \kappa \mathbf{p}(s). \quad (2)$$

Desde que $\mathbf{t}$ e $\mathbf{p}$ sejam vetores ortogonais e unitários, podemos reescrever a curvatura da seguinte forma

$$\kappa = |\dot{\mathbf{x}} \times \ddot{\mathbf{x}}| = |\mathbf{x}' \times \mathbf{x}''| \left(\frac{dt}{ds} \right)^3, \quad (3)$$

a partir da equação 3.5 temos

$$\kappa = \frac{|\mathbf{x}' \times \mathbf{x}''|}{|\mathbf{x}'|^3} = \frac{\sqrt{(\mathbf{x}' \times \mathbf{x}'')^2}}{\sqrt{\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}'}}. \quad (4)$$

Pela seguinte identidade

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}), \quad (5)$$

temos por fim,

$$\kappa = \frac{\sqrt{(\mathbf{x}' \times \mathbf{x}'') \cdot (\mathbf{x}' \times \mathbf{x}'')}}{\sqrt{\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}'}} = \frac{\sqrt{(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}')(\mathbf{x}'' \cdot \mathbf{x}'') - (\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}'')^2}}{(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}')^{\frac{3}{2}}} \quad (6)$$

APÊNDICE B – Torção em termos das derivadas da função $\mathbf{x}(s)$

Inicialmente é necessário aplicar a equação 3.15 na equação 3.20. Assim, temos

$$\tau = -\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{b}} = -\mathbf{p} \cdot \frac{d}{ds} (\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{p}) = -\mathbf{p} \cdot \left((\ddot{\mathbf{x}} \times \mathbf{p}) + (\dot{\mathbf{x}} \times \dot{\mathbf{p}}) \right) \quad (7)$$

pode-se observar que $(\ddot{\mathbf{x}} \times \mathbf{p})$ é um vetor ortogonal a $\mathbf{p}$ e portanto

$$\mathbf{p} \cdot (\ddot{\mathbf{x}} \times \mathbf{p}) = |\mathbf{p} \quad \ddot{\mathbf{x}} \quad \mathbf{p}| = 0. \quad (8)$$

Então ficamos com

$$\tau = -\mathbf{p} \cdot (\dot{\mathbf{x}} \times \dot{\mathbf{p}}), \quad (9)$$

inserindo $\mathbf{p} = \rho \ddot{\mathbf{x}}$ na equação 9 encontramos,

$$\tau = -\rho \ddot{\mathbf{x}} \cdot (\dot{\mathbf{x}} \times \rho \ddot{\mathbf{x}}) = -\rho^2 |\ddot{\mathbf{x}} \quad \dot{\mathbf{x}} \quad \ddot{\mathbf{x}}|. \quad (10)$$

Já é sabido que $\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{\sqrt{\ddot{\mathbf{x}} \cdot \ddot{\mathbf{x}}}}$, assim por fim podemos reescrever a equação 10 na forma

$$\tau = -\frac{|\ddot{\mathbf{x}} \quad \dot{\mathbf{x}} \quad \ddot{\mathbf{x}}|}{\ddot{\mathbf{x}} \cdot \ddot{\mathbf{x}}} \quad (11)$$

APÊNDICE C – Discriminante da Primeira Forma Fundamental como positivo definido

Antes de analisar o discriminante da PFF, vamos dar um pouco de atenção para a soma ao quadrado dos determinantes do Jacobiano (3.32) e, obviamente, esta soma é igual a zero,

$$\left(\frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} - \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_2}{\partial u^1}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2} - \frac{\partial x_2}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} - \frac{\partial x_3}{\partial u^2} \frac{\partial x_1}{\partial u^1}\right)^2 > 0. \quad (12)$$

Abrindo os quadrados, encontramos

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} - 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2}\right) + \\ & + \left(\frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} - 2 \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2}\right) + \\ & + \left(\frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} - 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2}\right) > 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Agora, dando atenção para o discriminante da PFF, $g = g_{11}g_{22} - (g_{12})^2$, claramente, podemos afirmar que $g_{11} > 0$ e $g_{22} > 0$ e analisando cada componente de g temos,

$$g_{11} = \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1 = \left(\frac{\partial x_1}{\partial u^1}, \frac{\partial x_2}{\partial u^1}, \frac{\partial x_3}{\partial u^1}\right) \cdot \left(\frac{\partial x_1}{\partial u^1}, \frac{\partial x_2}{\partial u^1}, \frac{\partial x_3}{\partial u^1}\right) = \left(\frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2}\right), \quad (14)$$

analogamente,

$$g_{22} = \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_2 = \left(\frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2}\right). \quad (15)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} g_{11}g_{22} = & \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \\ & + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \\ & + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2}, \end{aligned} \quad (16)$$

e

$$\begin{aligned}
(g_{12})^2 &= (x_2 \cdot x_2)^2 = \left[\left(\frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} + \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} + \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2} \right) \right]^2 = \\
&= \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} + \\
&+ 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2} + 2 \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2},
\end{aligned} \tag{17}$$

Por fim, temos o discriminante dado por

$$\begin{aligned}
g &= \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^2)^2} + \\
&+ \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_1}{(\partial u^2)^2} + \frac{\partial^2 x_3}{(\partial u^1)^2} \frac{\partial^2 x_2}{(\partial u^2)^2} - 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} - \\
&- 2 \frac{\partial x_1}{\partial u^1} \frac{\partial x_1}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2} - 2 \frac{\partial x_2}{\partial u^1} \frac{\partial x_2}{\partial u^2} \frac{\partial x_3}{\partial u^1} \frac{\partial x_3}{\partial u^2}.
\end{aligned} \tag{18}$$

Observando as equações (14) e (18), logo percebemos que são iguais. Portanto, podemos afirmar, com segurança que o discriminante da PFF é um positivo definido.

APÊNDICE D – Segunda derivada do vetor $\mathbf{x}$ com respeito ao arco s

Aplicando mudança de variáveis na primeira derivada em s do vetor $\mathbf{x}$ e, em seguida, aplicar a definição 3.51, assim encontramos

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \frac{du^2}{ds} = \mathbf{x}_\alpha \dot{u}^\alpha. \quad (19)$$

Utilizando deste resultado podemos agora derivar mais uma vez a equação anterior e encontramos o seguinte formato

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{x}} &= \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \frac{du^2}{ds} \right) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial s} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \right) \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \left(\frac{\partial}{\partial s} \frac{du^1}{ds} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial s} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \right) \frac{du^2}{ds} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \left(\frac{\partial}{\partial s} \frac{du^2}{ds} \right) \\ &= \left[\left(\frac{\partial}{\partial u^1} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial}{\partial u^2} \frac{du^2}{ds} \right) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \right] \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \frac{d^2 u^1}{ds^2} + \left[\left(\frac{\partial}{\partial u^1} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial}{\partial u^2} \frac{du^2}{ds} \right) \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \right] \frac{du^2}{ds} + \\ &\quad + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \frac{d^2 u^2}{ds^2} \\ &= \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial u^1 \partial u^1} \frac{du^1}{ds} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial u^2 \partial u^1} \frac{du^2}{ds} \frac{du^1}{ds} + \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial u^1 \partial u^2} \frac{du^1}{ds} \frac{du^2}{ds} + \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial u^2 \partial u^2} \frac{du^2}{ds} \frac{du^2}{ds} + \\ &\quad + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^1} \frac{d^2 u^1}{ds^2} + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^2} \frac{d^2 u^2}{ds^2} \\ &= x_{\alpha\beta} \dot{u}^\alpha \dot{u}^\beta + x_{\alpha} \ddot{u}^\alpha \end{aligned} \quad (20)$$

APÊNDICE E – Propriedades tensoriais do tensor métrico

Antes de falarmos do tensor métrico e suas propriedades é necessário apresentar o que são componentes contravariantes e covariantes de um vetor. Uma componente contravariante é o comprimento da projeção paralela de um vetor arbitrário $\mathbf{v}$. Para um sistema de coordenadas x_1 e x_2 ortogonais, podemos representar o vetor $\mathbf{v}$ da seguinte forma

$$\mathbf{v} = a^\alpha \mathbf{x}_\alpha. \quad (21)$$

Porém, para um sistema de coordenadas x_1 e x_2 não ortogonais, conforme a figura 1, dado um ângulo γ_α entre $\mathbf{v}$ e o eixo x_α , $\alpha = 1, 2$. Então o comprimento da projeção ortogonal é dado pela expressão

$$L_\alpha = |\mathbf{v}| \cos \gamma_\alpha = \frac{|\mathbf{x}_\alpha|}{|\mathbf{x}_\alpha|} |\mathbf{v}| \cos \gamma_\alpha = \frac{\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{v}}{\sqrt{(\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{x}_\alpha)}} = \frac{\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{v}}{\sqrt{g_{\alpha\alpha}}}. \quad (22)$$

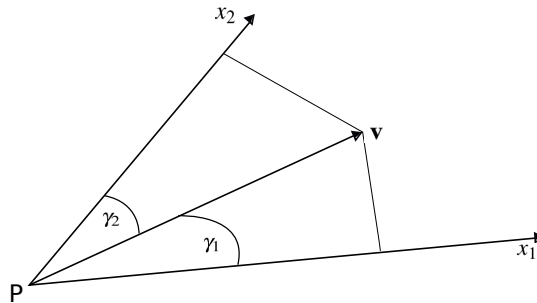
As quantidades $a_\alpha = \mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{v}$ são chamadas de componentes covariantes do vetor $\mathbf{v}$. Assim, podemos escrever

$$a_\alpha = \mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{v} = \mathbf{x}_\alpha \cdot a^\beta \mathbf{x}_\beta = g_{\alpha\beta} a^\beta, \quad (23)$$

onde também podemos obter sua inversa

$$a^\beta = g^{\alpha\beta} a_\alpha. \quad (24)$$

Figura 1 – Base de vetores não ortogonal



Fonte: Autor

Assim, podemos observar as propriedades tensoriais do tensor métrico, onde índices que estão acima descem e vice-versa e em seguida uma contração destes índices.

APÊNDICE F – Uma breve abordagem sobre efeito Hall quântico

Ao analisar cargas em movimento em um região embebida por um campo magnético, observa-se que estas cargas estão sujeitas a uma força perpendicular a seu movimento. Isto pode parecer mais claro ao analisar a força de Lorentz,

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (25)$$

onde q é a carga da partícula, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ são, respectivamente, o campo elétrico e magnético e $\mathbf{v}$ a velocidade da partícula.

Para o caso, onde as cargas estão se movendo em um fita condutora permeada por um campo magnético, observa-se a deflexão destas cargas para um dos lados da fita, o que resulta em uma separação de cargas (TIPLER; MOSCA, 2000). Este fenômeno é chamado de *Efeito Hall*. A diferença de potencial entre as extremidade da fita é chamada de *tensão Hall* e dada pela expressão

$$V_H = \frac{I}{n_e \ell q} B, \quad (26)$$

onde I é a corrente elétrica, n_e o número de portadores de carga, ℓ a distância entre as extremidades da fita. q a carga do portador e B o campo magnético. Podemos associar a equação anterior com a lei de Ohm, $V = RI$, e consequentemente, uma resistência transversal a fita, responsável pela deflexão das cargas, no qual denomina-se de *resistência Hall*, dada por:

$$R_H = \frac{B}{n_e \ell q}. \quad (27)$$

Em consequência, sabendo que resistividade é dada por $\rho = \frac{RA}{l}$, onde R é a resistência, A a área da fita e ρ a resistividade. Para uma fita quadrada, $A = l^2$, a partir da resistência Hall, pode-se associar uma resistividade Hall

$$\rho_H = \frac{B}{n_e q}. \quad (28)$$

Dado que a condutividade é $\sigma = \frac{1}{\rho}$, temos também uma *condutividade Hall*, σ_H

A equação (26) anterior induz a conclusão de que a tensão Hall deve aumentar linearmente com o campo magnético. Porém, em 1980 Klaus von Klitzing ao estudar semicondutores em baixas temperaturas e campos magnéticos intensos, observou que no gráfico de tensão Hall

por campo magnético aparecia certos *platôs*¹, ou seja, a tensão Hall é *quantizada*. Com o efeito Hall quântico, von Klitzing recebeu o Prêmio Nobel em Física em 1985 (TIPLER; MOSCA, 2000).

O efeito Hall clássico pode ser descrito a partir de uma fita condutora. Para o caso do efeito Hall quântico, pode ser utilizado sistemas de gás de elétrons bidimensional com um campo magnético perpendicular. Uma ferramenta para entender o efeito Hall quântico é a quantização de Landau. Para isso, deve-se utilizar a Hamiltoniana de um sistema que está sob ação de um campo magnético, dada por (GOERBIG, 2009):

$$\mathbf{H} = \frac{[\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2}{2m} = \frac{\Pi^2}{2m}. \quad (29)$$

Assumindo que o gás de elétrons bidimensional está no plano xy , a equação anterior pode ser reescrita na forma:

$$\mathbf{H} = \frac{[\Pi_x^2 + \Pi_y^2]}{2m}. \quad (30)$$

Reescrevendo os operadores Π_x e Π_y em termos dos operadores escada, $\Pi_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\ell_B} (a^\dagger + a)$ e $\Pi_y = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}\ell_B} (a^\dagger - a)$, onde $\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$, temos uma analogia com um oscilador harmônico (GOERBIG, 2009). Como consequência a energia do sistema é quantizada, dada por

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (31)$$

onde ω_c é chamado de *frequência de ciclotron* e dado por $\omega_c = \frac{\hbar}{m\ell_B^2}$. Sendo assim, como a energia do sistema é quantizada, pelos chamados *níveis de Landau*, o aparecimento de platôs é uma assinatura do efeito Hall quântico.

¹ Platôs, em gráficos, são caracterizados por uma sequência de pontos cuja tangente da curva é igual a zero.