

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO - UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
CURSO DE FÍSICA

MARCELO AUGUSTO DOS REIS FEITOSA

EFEITOS DA VIOLAÇÃO DE SIMETRIA DE LORENTZ SOBRE O
MODELO DE KRONIG-PENNEY

São Luís, MA
2019

MARCELO AUGUSTO DOS REIS FEITOSA

**Efeitos da violação de simetria de Lorentz sobre o modelo de
Kronig-Penney**

Dissertação apresentada a Universidade Federal do Maranhão como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em física.

Orientador:

Manoel Messias Ferreira Junior

Coorientador:

Marco Schreck

São Luís, MA

2019

FICHA CATALOGRÁFICA

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

Feitosa, Marcelo Augusto dos Reis.

Efeitos da violação de simetria de Lorentz sobre o modelo de Kronig-Penney / Marcelo Augusto dos Reis

Feitosa. - 2019.

93 p.

Coorientador(a): Marco Schreck.

Orientador(a): Manoel Messias Ferreira Jr.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-graduação em Física/ccet, Universidade Federal do Maranhão, Universidade Federal do Maranhão (UFMA)), 2019.

1. Bandas de Energia. 2. Modelo de Kronig-Penney. 3. Violação de Lorentz. I. Ferreira Jr., Manoel Messias. II. Schreck, Marco. III. Título.

Marcelo Augusto dos Reis Feitosa



Título

Dissertação apresentada ao programa de pós graduação em física (PPGF) da Universidade Federal do Maranhão, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em física.

Área de concentração: Física

Aprovada em 25 de julho de 2019.

Banca Examinadora

Manoel Messias Ferreira Jr. - UFMA (Orientador)

Marco Schreck - UFMA (Coorientador)

Edilberto Oliveira - UFMA

Fernando Jorge Sampaio Moraes - UFRPE

São Luís, MA

2019

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente aos meus avós e aos meus pais pois sem eles e sem a ajuda e amor deles eu não estaria aqui concluindo mais uma etapa na vida acadêmica.

A toda a minha família, irmãos, primos e tios.

Aos meus amigos e colegas de UFMA durante a graduação e mestrado e o GFTPC-UFMA.

Ao meu orientador Manoel Messias que me orientou desde a graduação sempre com uma visão crítica e instrutiva para que eu obtivesse uma melhor compreensão desde a física básica aos estudos mais avançados.

A CAPES pelo formento durante os anos de mestrado.

E também, como não havia de esquecer, ao monstro do espaguete voador.

Riders on the storm
Riders on the storm
Into this house we're born
Into this world we're thrown
Like a dog without a bone
An actor out on loan
Riders on the storm

The Doors - Riders on the storm

Resumo

A quebra de simetria de Lorentz e seus possíveis efeitos em sistemas físicos tem sido tema de investigações recorrentes na atualidade, dentro de um programa de física de precisão para estabelecimento dos limites da validade desta simetria. Tais estudos não se restringem apenas à teoria de campos ou contextos de altas energias, uma vez que abarcam também sistemas da física da matéria condensada, definidos em baixíssimas energias. Neste trabalho realizamos uma revisão sobre o modelo de Kronig-Penney (KP) quântico, primeiramente tratado por meio da equação de Schrödinger. Depois, abordamos o modelo de KP quântico-relativístico, tratado por meio da equação de Dirac. Apresentamos uma revisão sobre os setores fotônico e fermiônico do MPE, abordamos o cerne do modelo de KP, versão não-relativístico e relativística, obtendo as relações de bandas de energia para ambos. Verificamos que, em se tratando do modelo de KP relativístico os efeitos acarretam em uma redução das bandas de energia, quando comparada ao caso não relativístico. O mesmo ocorre para os "gaps" entre as bandas, mas de uma forma menos significativa. Em seguida, buscamos investigar os efeitos de um termo de violação da simetria de Lorentz (VSL), definido no contexto do setor fermiônico do Modelo Padrão Estendido de Colladay & Kostelecky, sobre esse sistema. Especificamente, consideramos a equação de Dirac modificada pelo termo axial de VSL, $\bar{\psi} b^\mu \gamma_5 \gamma^\mu \psi$, onde b^μ representa o vetor de violação. Em seguida, iniciamos o desenvolvimento do modelo de Kronig-Penney na presença do termo de VSL, onde consideramos as configurações "timelike" e "spacelike" do campo de fundo, b^μ . Como passo inicial, obtemos as soluções espaciais de partícula livre da equação de Dirac correspondente. Em seguida, usamos tais espinores para obter as relações de banda de energia do modelo KP relativístico modificado pelo termo de quebra. Verificamos que esse procedimento torna-se particularmente simples para um caso unidimensional, $\mathbf{p} = (0, 0, 0, p_z)$, para a configuração "spacelike" do campo de fundo, $\mathbf{b} = (0, 0, 0, b_z)$, para o qual a relação de bandas de energia possui a mesma estrutura geral daquela sem VL, mas com fatores Γ modificados, dependentes do vetor de quebra \mathbf{b} , definidos neste trabalho. Por fim, ainda resta analisar como os fatores de VSL afetam a largura das bandas e dos "gaps" entre as bandas.

Palavras chave: Violação de Lorentz, Modelo de Kronig-Penney, Bandas de energia

Abstract

The breaking of Lorentz symmetry and its possible effects on physical systems has been a topical issue in actual investigations, belonging to a precision program for establishing the limits of this symmetry in nature. These studies are not constrained to the field theory or high energy systems, since they also involve other areas, like condensed matter physics. In this work we revisit the Kronig-Penney model, first addressed by means the Schrodinger equation, and second by means of the Dirac equation in its quantum-relativistic version. We revise the nonrelativistic and relativistic Kronig-Penney model, achieving the energy bands relations to both cases. We verify that in the case of relativistic KP model the effects entail in an energy band reduction, if compared to the non-relativistic case. The same happens to gaps but in a less significant way. In the sequel, we investigate the effects of the Lorentz-violating term, $\bar{\psi}b^\mu\gamma_5\gamma^\mu\psi$, belonging to the fermionic sector of the SME of Colladay & Kostelecky, on the Kronig-Penney model. Here, b^μ represents the Lorentz-violating background. As an initial step, we obtain the associated free particle spinor solutions of the modified Dirac equation. We use such spinors to develop the KP model with Lorentz violation and achieve the modified band relations. We verify that the procedure become specially simplified for the unidimensional case, $\mathbf{p} = (0, 0, 0, p_z)$, for the spacelike configuration of the background, $\mathbf{b} = (0, 0, 0, b_z)$. The energy band relation has the same general structure from that obtained without LV, with the difference that dimensionless quantity Γ , defined in that work, carries now the dependence on the Lorentz-violating term. It still misses to analyse how the LV terms affects the band energy structure.

Key-words: Lorentz Violation, Kronig-Penney Model, Energy Bands

Lista de Figuras

- 2.1 Gráfico para os valores de vácuo do modelo ϕ^4 onde foi considerado para (a) e (b), respectivamente, as condições $m \geq 0$ e $m < 0$ p. 26
- 4.1 Gráfico esquemático para os níveis de energia de metais, semi-metais, e semicondutores. Retirado da Ref. [11] p. 37
- 4.2 Plot de $\cos x + \frac{\lambda}{2x} \sin x$ para o modelo de Kronig-Penney unidimensional com potencial delta. O lado esquerdo de (4.38) tem valores no intervalo $[-1, 1]$. O lado direito é representado pela curva. Nota-se que a equação de Schrodinger é satisfeita nas regiões onde a curva está na região delimitada pelas retas paralelas à abscissa. [Gráfico retirado de Ref. [9]] p. 42
- 4.3 O gráfico (a) é referente à relação de dispersão para o elétron livre em função do número de onda k . O gráfico (b) mostra, para a rede unidimensional cristalina, as energias permitidas e o gap que separa a primeira zona de Brillouin da segunda. Figura retirada da Ref. [11] p. 44
- 4.4 Distribuição de densidade para as ondas estacionárias e progressivas na rede cristalina. p. 45
- 4.5 Potencial periódico para o modelo de Kronig-Penney. [Retirado da Ref. [11]] p. 46
- 4.6 Gráfico ilustrativo do lado esquerdo da expressão 4.79, limitada pelos valores ± 1 , que permite entender regiões permitidas (entre os valores -1 e +1) e proibidas (além dos valores -1 ou +1). [Figura retirada da Ref. [11]] p. 49
- 4.7 Potencial degrau com partículas incidentes e refletidas. Figura baseada na Ref. [24] p. 53
- 4.8 Gráfico representativo da série de potenciais para o modelo de Kronig-Penney. As regiões 1 e 2 são regiões com e sem potencial, respectivamente. Temos que o tamanho da célula unitária é " a " e a largura do poço é " l ". Figura retirada da Ref. [24] p. 56
- 4.9 Ilustração da largura de bandas de energia, como função da constante de rede, para as duas bandas de energia do modelo de KP relativístico representadas por (\times) e ($+$). Neste gráfico, a constante de rede a é variável, $b = 10^{-5}a$ e o potencial dado por $V_0b = 4.1095 \times 10^{-4}$. Figura retirada do cap. 9 da Ref. [24] p. 60

4.10	Bandas de energia para o modelo de KP relativístico unidimensional com $a = 2\lambda_C$, $b = 1.5 \times 10^{-2}\lambda_C$, com λ_C sendo o comprimento de onda de Compton. A curva em pontos indica a expressão não relativística, enquanto a curva em cruces indica a expressão relativística. Comparando ambos os casos, percebemos uma redução na largura da banda. [Gráfico retirado da Ref. [24]]	p. 61
5.1	Partículas incidentes sobre um potencial do tipo degrau de "altura" $-V_0$. As regiões I e II indicam regiões com ausência e presença de potencial.	p. 73
5.2	Gráfico com para o modelo de KP com uma série de poços de potenciais com a a constante de rede e l a largura do poço. As regiões I e II são regiões com $V(x) = 0$ e $V(x) = -V_0$, respectivamente. Figura retirada da Ref. [24].	p. 76
5.3	Partículas incidentes sobre um potencial do tipo degrau de "altura" $-V_0$. As regiões I e II indicam regiões sem e com potencial.	p. 80

Sumário

1	Introdução	p. 11
2	Simetrias, simetria de Lorentz, grupo de Lorentz, quebra de simetria	p. 14
2.1	Simetrias na física e quantidades conservadas	p. 14
2.2	Simetria de Lorentz e grupo de Lorentz	p. 16
2.2.1	Representações espinorais do grupo de Lorentz	p. 20
2.3	Quebra espontânea de simetria: potencial ϕ^4	p. 24
3	Violação da simetria de Lorentz e Modelo Padrão Estendido	p. 27
3.1	Setor eletromagnético do MPE	p. 28
3.2	Setor fermiônico no MPE	p. 30
3.2.1	Limite não relativístico para o setor fermiônico do MPE	p. 34
4	Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) quântico e quântico-relativístico	p. 36
4.1	Potenciais periódicos na equação de Schrodinger	p. 37
4.1.1	Modelo de Kronig-Penney com potencial δ	p. 39
4.2	Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) não relativístico com potencial do tipo degrau	p. 42
4.2.1	Modelo de Kronig-Penney não-relativístico e a relação para as bandas de energia	p. 45
4.3	Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) relativístico	p. 49
4.3.1	Relação para as bandas de energia permitidas	p. 55
4.4	Matriz de espalhamento relativística: uma dedução alternativa	p. 61

5 Modelo de Kronig-Penney relativístico e unidimensional na presença de violação de Lorentz	p. 65
5.1 Introdução	p. 65
5.2 Soluções de partícula livre	p. 66
5.2.1 Configuração de "background"tipo-tempo	p. 67
5.2.2 Configuração de "background"tipo-espaço	p. 71
5.3 Modelo de KP em configuração de campo fundo puramente tipo-espaço	p. 72
5.3.1 Relação para as bandas de energia permitidas	p. 75
5.4 Modelo de KP em configuração de campo fundo puramente tipo-tempo	p. 79
6 Conclusões	p. 84
Apêndice A – Equação de Dirac	p. 85
Referências Bibliográficas	p. 89

1 Introdução

A percepção e idéia de simetria vem de muito tempo atrás, mais precisamente das civilizações antigas que notavam regularidades e padrões característicos inerentes a natureza, com tais simetrias como inspiração na construção de obras de artes, construções arquitetônicas etc. Mais adiante com outras civilizações como a grega, o estudo da simetria foi tomando mais forma e sendo mais aprofundado, como por exemplo no estudo de figuras geométricas. Na Ref. [2] temos que no Timeu de Platão é apresentado uma descrição para os elementos naturais usando poliedros regulares, onde o fogo teria a forma de tetraedro regular, a terra a forma de um cubo, a água a forma de um icosaedro e o universo um dodecaedro regular. Além do mais estas figuras foram usadas para uma descrição física da arquitetura planetária no livro "Mysterium Cosmographicum" de Kepler.

Em um concepção moderna temos que além da beleza e harmonia o conceito de simetria se fundamenta em uma relação de igualdade, ou seja, o objeto em estudo deve apresentar suas mesmas características sendo invariante ao realizarmos algumas operações sobre ele. Na geometria temos que certas formas apresentam invariância devido a algumas transformações ou operações. Estas transformações estão incluídas em uma área da matemática chamada teoria de grupos. Um grupo geralmente está associado a alguma simetria e operações de simetria. Na física vemos que suas leis possuem invariância sobre certas transformações de simetrias contínuas e que essa invariância leva a conservação de grandezas físicas segundo o teorema de Noether. Na relatividade de Einstein temos a simetria de Lorentz que diz que as leis da física são invariantes para observadores em referenciais inerciais. O grupo relacionado a esta simetria é o grupo de Lorentz do qual podemos derivar a equação de Dirac que é uma equação quântica relativística que descreve férmions. Em teorias modernas como a do Modelo Padrão (MP), que é uma teoria quântica relativística de campo e que descreve as forças fundamentais da natureza, temos que sua caracterização é dada pelos grupos $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$.

Um outro viés do estudo de simetria é o caso de quebra de simetria de onde novas simetrias são reveladas e que objetos de estudos que são invariantes sobre a transformação de simetria inicial não apresentam mais esta invariância. Na física a quebra de simetria pode ocorrer de duas formas: espontânea e explícita. A quebra espontânea ocorre quando o estado fundamental ou de mínima energia de um sistema físico não é mais invariante sob operações de simetrias da condição inicial do sistema. Exemplos de quebra de simetria espontânea é o caso do potencial ϕ^4 , mecanismo de Higgs etc. Já na quebra de simetria explícita são adicionados à mão termos, geralmente tensores ou vetores nomeados como campos de fundo, advindos de uma quebra de simetria de uma teoria numa escala de maior energia. Espera-se que estes termos tenham valor esperado diferente de zero, ou seja, $\langle 0|T^\mu|0\rangle \neq 0^\mu$. Como exemplo de quebra espontânea em uma teoria é o que foi desenvolvido por Kosteletsky e Colladay na Ref [3]. Neste trabalho foi proposto

termos de violação de simetria de Lorentz e CPT que posteriormente foram adicionados ao MP formando o Modelo Padrão Estendido (MPE) que é uma modificação do Modelo Padrão com a inclusão dos termos de quebra de simetria de Lorentz e CPT e sendo uma teoria mais completa. Um destes termos é o b^μ referente ao setor fermiônico do MPE e que é objeto de estudo neste trabalho, como foi desenvolvido e detalhado no capítulo 2. Desde a formulação do MPE muitos trabalhos foram desenvolvidos com respeito à quebra de simetria de Lorentz e CPT a fim de restringir o valores dos campos de fundo e em transições 1S-2S do hidrogênio e anti hidrogênio, como proposto nas Ref. [15], [19], [4]. Os efeitos dos termos de violação de simetria podem ser discutidos também no contexto de sistemas de matéria condensada (grafenos, redes ópticas etc) como proposto na Ref. [29] onde se analisa o tunelamento de Klein para a equação modificada de Dirac com o campo de fundo b^μ . Neste trabalho, como pode ser visto no capítulo 4, realizamos um estudo da equação de Dirac modificada com o termo de campo de fundo b^μ para o modelo de Kronig-Penney de uma rede cristalina unidimensional da qual analisaremos as relações de bandas de energia devido à introdução deste termo. Temos também que o estudo dos termos de violação de Lorentz pode ser feito em teorias quânticas não relativísticas, como na teoria quântica ondulatoria de Schrödinger. Isto é feito considerando o caso de limite não relativístico no setor fermiônico do MPE, abordado em Ref. [26]. Muitos trabalhos têm sido desenvolvidos neste limite em sistemas de matéria condensada [13]. Outros trabalhos como na Ref. [12] propõem que a violação de Lorentz se manifeste na mecânica quântica não relativística.

Um outro objeto de estudo neste trabalho, desenvolvido no capítulo 3, é o modelo de Kronig-Penney para uma cristal unidimensional, com o objetivo de encontrar a relação para as bandas de energia permitidas desse cristal. Estes apresentam uma periodicidade nos íons que os constituem, possuindo uma simetria translacional. O modelo de Kronig-Penney (KP) é proposto na teoria de elétrons quase livres onde ocorre a interação destes com os íons da rede. No modelo de elétrons livres não era considerado a influência dos íons e muitos fenômenos como o surgimento de bandas e "gaps" de energia e a consequente propriedade de ser um condutor, semi-condutor ou isolante de um metal não eram explicadas. Como veremos, as bandas e os "gaps" de energia são causados por reflexões de Bragg na rede cristalina. Ainda no capítulo 3 desenvolvemos o modelo de Kronig-Penney para um potencial de tipo δ e do tipo poço, obtendo as relações para as bandas de energia e verificando que para este último, no limite em que o potencial tende ao infinito e que a largura da barreira tende a zero, ele equivale ao resultado obtido no potencial δ . Além do mais analisamos o caso do modelo de KP relativístico onde verificamos que as bandas de energia apresentam a mesma estrutura das obtidas anteriormente com a diferença de que a relação de banda possui uma quantidade adimensional Γ , que é definida como uma razão que envolve os momentos e a energia. Outra diferença importante é que os efeitos relativísticos levam a redução relativística da largura das bandas e dos "gaps".

Por fim, no capítulo 4, e como principal objetivo deste trabalho, desenvolvemos o modelo de

KP quântico-relativístico com introdução do termo de violação de Lorentz b^μ na equação de Dirac (equação de Dirac modificada). Usamos do procedimento do capítulo 3 para encontrar as bandas de energia para este caso. Primeiramente, iniciamos o capítulo 4 com o vetor de fundo do tipo tempo $b^\mu = (b^0, \mathbf{0})$, obtendo a relação para as bandas de energia. Em seguida trabalhamos com o vetor de fundo do tipo espaço $b^\mu = (0, \mathbf{b})$, obtendo a relação para as bandas de energia deste caso. Por uma análise dos resultados iniciais vemos que as relações para as bandas de energia no caso tipo tempo apresentam uma estrutura de banda diferente das obtidas no capítulo anterior, agora com a presença do termo b^0 . No caso tipo espaço vemos que apresentam a mesma estrutura das bandas obtidas no capítulo 3 com a diferença de que a quantidade adimensional Γ tem uma composição diferente com o termos \mathbf{b} .

2 *Simetrias, simetria de Lorentz, grupo de Lorentz, quebra de simetria*

Pela definição na Ref. [8] "uma coisa é simétrica se alguém puder submetê-la a uma determinada operação e esta coisa parecer exatamente a mesma após esta operação". A história e estudo da simetria começa com os gregos, indicando inicialmente uma relação de comensurabilidade. Além da comensurabilidade, que se tornou uma propriedade mais específica da simetria, outras propriedades se tornaram importantes para o conceito de simetria como harmonia, beleza e unidade, Ref. [2].

Por conhecimento histórico, científico, factual, e por observação ao nosso redor, podemos notar que a simetria se faz presente em diversas áreas do conhecimento, assim como na própria natureza em si. No que diz respeito às ciências humanas, temos a utilização da simetria nas artes plásticas em geral, arquitetura, música, etc. sendo um elemento importante na busca do belo e da harmonia nessas áreas. Nas ciências exatas, simetria é introduzida como um aspecto característico de alguns sistemas naturais ou abstratos. Na física existem diversas simetrias importantes como: invariância translacional no espaço e no tempo, invariância rotacional etc. Como um exemplo temos as estruturas cristalinas periódicas com simetrias translacionais em que a mesma configuração de rede é observada ao nos deslocarmos para uma célula seguinte do cristal ou ao fazermos uma determinada rotação em relação a algum eixo que passa por essa célula. Além destes tipos temos muitas outras simetrias, que caracterizam propriedades geométricas de campos e quantidades vetoriais tais como as axiais, radiais, centrais. Existem também as simetrias das leis da física sob algumas transformações. Existem as simetrias discretas do teorema CPT, relacionadas a carga, paridade e tempo. A simetria do princípio da relatividade, estabelecida por Einstein em 1905, é um marco na história da física e configura um novo tipo de simetria, que é hoje denominada de simetria de Lorentz, sendo uns dos elementos de estudo do presente trabalho.

2.1 *Simetrias na física e quantidades conservadas*

As simetrias e o seu estudo desempenham um papel importante na física pois estão diretamente relacionadas a quantidades físicas conservadas ou invariantes. Pelo teorema de Noether

temos que para cada simetria contínua em física existe uma lei de conservação. As simetrias dos sistemas físicos podem ser classificadas em contínuas e discretas. Como simetrias contínuas temos a homogeneidade do espaço ou do tempo, que garantem, respectivamente, a conservação do momento e da energia. Temos também a isotropia do espaço que leva a conservação do momento angular e às simetrias de "gauge" e a simetria de Lorentz. Como exemplo de simetrias discretas temos as simetrias C (carga), P (paridade) e T (tempo) importantes em sistemas quânticos relativísticos como aqueles descritos pela equação de Dirac, que é invariante sob C, P e T.

Iniciamos, como exemplo, mostrando que as operações de translação e rotação aplicadas na segunda lei de Newton garantem a homogeneidade e isotropia do espaço para esta lei. Considerando dois observadores que estão nos sistemas inerciais A e B com B a uma distância d de A , tomando A como a origem. Queremos saber se a mesma lei física em consideração se apresenta da mesma forma para o observador B transladado. Considerando que ambos medem um força, restrita na direção x , em um ponto P a uma distância x de A e distante $X = x - d$ de B , temos que as forças medidas por A e B são, respectivamente

$$F_x = m \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad (2.1)$$

$$F_X = m \frac{d^2 X}{dt^2}. \quad (2.2)$$

Substituindo o valor de X em (2.2), obtemos

$$F_X = m \frac{d^2 (x - d)}{dt^2} = m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x, \quad (2.3)$$

o que demonstra que para o observador B a segunda lei de Newton se comporta da mesma forma para o observador em A . Dizemos então que esta lei é invariante perante uma operação de translação e portanto é homogênea no espaço.

Verificamos agora com se dá a transformação da segunda lei de Newton sob a operação de rotação. Consideramos os mesmos observadores A e B com o sistema referencial na mesma origem e com B rotacionado por um ângulo θ em relação a abicissa de A . Temos que a relação de transformação entre as coordenadas de cada observador é dada por

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta, \quad (2.4)$$

$$y' = y \cos \theta - x \sin \theta, \quad (2.5)$$

$$z' = z. \quad (2.6)$$

A relação entre as componentes da força para os dois observadores é dada por

$$F'_x = F_x \cos \theta + F_y \sin \theta, \quad (2.7)$$

$$F'_y = F_y \cos \theta - F_x \sin \theta, \quad (2.8)$$

$$F'_z = F_z. \quad (2.9)$$

Diferenciando as equações (2.4), (2.5) e (2.6) em relação ao tempo e depois multiplicando pela massa, sabendo que o ângulo θ é constante, obtemos

$$m \frac{d^2 x'}{dt^2} = m \frac{d^2 x}{dt^2} \cos \theta + m \frac{d^2 y}{dt^2} \sin \theta, \quad (2.10)$$

$$m \frac{d^2 y'}{dt^2} = m \frac{d^2 y}{dt^2} \cos \theta - m \frac{d^2 x}{dt^2} \sin \theta, \quad (2.11)$$

$$z' = z. \quad (2.12)$$

Como as equações (2.7), (2.8) e (2.9) podem ser escritas da seguinte forma

$$F'_x = \frac{d^2 x}{dt^2} \cos \theta + \frac{d^2 y}{dt^2} \sin \theta, \quad (2.13)$$

$$F'_y = \frac{d^2 y}{dt^2} \cos \theta - \frac{d^2 x}{dt^2} \sin \theta, \quad (2.14)$$

$$F'_z = \frac{d^2 z}{dt^2}, \quad (2.15)$$

comparando os lados direitos de (2.10) até (2.15) temos que para o observador B rotacionado a segunda lei de Newton é preservada, mostrando assim a sua característica isotópica.

2.2 Simetria de Lorentz e grupo de Lorentz

Antes de abordarmos a violação de simetria de Lorentz, precisamos explicar sobre esta simetria e suas propriedades. A simetria de Lorentz consiste na invariância das leis físicas sob as transformações de Lorentz, como inicialmente demonstrado por Lorentz para as equações de Maxwell. O mesmo vale para a equação de Dirac e eletrodinâmica quântica, assim como para as outras teoria do Modelo Padrão das interações fundamentais. No fundo, tal invariância é o cerne do princípio da relatividade, um dos postulados da Teoria da Relatividade Restrita (TRR), enunciados por Einstein em 1905. A TRR está alicerçada nos postulados abaixo [24]:

1. Todos os referenciais são equivalentes, de modo que as leis físicas são escritas na mesma forma em todos os referenciais.
2. A velocidade da luz no vácuo assume o mesmo valor, c , em todos os referenciais inerciais, sendo uma constante universal.

As transformações de coordenadas entre dois referenciais inerciais, S e S' , são dadas através

da seguinte relação:

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + \zeta^{\mu}, \quad (2.16)$$

com

$$\Lambda^{\mu}_{\nu} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\nu}}, \quad (2.17)$$

onde Λ^{μ}_{ν} são os elementos da matriz de Lorentz, Λ , e ζ é o parâmetro de translação, sendo estas transformações pertencentes ao grupo de Poincaré. Com $\zeta^{\mu} = 0$, temos as transformações do grupo de Lorentz. Importante mencionar que estas transformações deixam invariante a distância entre dois pontos no espaço de Minkowski, medida por referenciais diferentes, ou seja,

$$ds^2 = ds'^2. \quad (2.18)$$

Podemos demonstrar que no espaço de Minkowski as transformações de Lorentz deixam invariante o intervalo relativístico assim como a métrica $g_{\mu\nu}$, aqui definida por

$$g_{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1). \quad (2.19)$$

Sabemos que

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}, \quad (2.20)$$

$$ds'^2 = g_{\alpha\beta} dx'^{\alpha} dx'^{\beta} = g_{\alpha\beta} \Lambda^{\alpha}_{\mu} \Lambda^{\beta}_{\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}, \quad (2.21)$$

obtemos pela comparação da Eq. (2.20) com (2.21), que

$$g_{\alpha\beta} \Lambda^{\alpha}_{\mu} \Lambda^{\beta}_{\nu} = g_{\mu\nu}, \quad (2.22)$$

que se escreve também na forma matricial,

$$\Lambda^T g \Lambda = g, \quad (2.23)$$

onde Λ é a matriz do grupo Lorentz, que possui uma estrutura do tipo $O(1, 3)$. A relação (2.23) nos diz que o tensor métrico $g_{\mu\nu}$ é invariante sob as transformações de Lorentz.

Tomando o determinante de relação (2.23), temos

$$\det g = \det(\Lambda^T g \Lambda) = \det(\Lambda)^2 \det(g), \quad (2.24)$$

o que implica em

$$\det \Lambda = \pm 1, \quad (2.25)$$

que determina os dois tipos de transformações de Lorentz: as próprias ($\det \Lambda = +1$) e as impróprias ($\det \Lambda = -1$).

Da Eq. (2.23), com $\mu = 0$ e $\nu = 0$, temos

$$(\Lambda_0^0)^2 = 1 + \sum_k (\Lambda_0^k)^2, \quad (2.26)$$

o que é compatível com $|\Lambda_0^0| \geq 1$. Podemos então fazer a seguinte classificação para as transformações de Lorentz:

$$\det(\Lambda) = +1, \Lambda_0^0 \geq +1 \text{ (própria ortócrona)}, \quad (2.27)$$

$$\det(\Lambda) = +1, \Lambda_0^0 \leq -1 \text{ (própria não-ortócrona)}, \quad (2.28)$$

$$\det(\Lambda) = -1, \Lambda_0^0 \geq +1 \text{ (imprópria ortócrona)}, \quad (2.29)$$

$$\det(\Lambda) = -1, \Lambda_0^0 \leq -1 \text{ (imprópria não-ortócrona)}, \quad (2.30)$$

com (2.27) pertencendo ao subgrupo L_+^\uparrow e (2.28), (2.29) e (2.30) aos subconjuntos $L_+^\downarrow, L_-^\uparrow, L_-^\downarrow$, respectivamente. Destes subconjuntos somente L_+^\uparrow forma um grupo ou subgrupo propriamente, e será estudado com mais detalhes ao encontrarmos os seus geradores. Como exemplo transformações associadas a L_+^\uparrow temos as rotações espaciais próprias e os "boosts" de pseudo rotações. O grupo L_+^\uparrow apresenta 6 parâmetros independentes: 3 associados às três rotações espaciais e 3 associados aos "boosts". Os subconjuntos, $L_+^\downarrow, L_-^\uparrow, L_-^\downarrow$ não constituem grupos propriamente ditos.

Para a construção do geradores do grupo L_+^\uparrow , fazemos a seguinte proposta

$$\Lambda = e^{iL}, \quad (2.31)$$

onde L é uma matriz 4×4 e $\Lambda \in L_+^\uparrow$. Tomando o determinante da expressão (2.31),

$$\det \Lambda = 1 = \det(e^{iL}) = e^{iTr(L)}, \quad (2.32)$$

vemos que $Tr(L) = 0$ e as matrizes L devem ser reais. Para conhecer outras características das matrizes L , trabalhamos com a relação (2.23), multiplicando-a por g . Temos assim que

$$g\Lambda^T g\Lambda = gg = 1_{4 \times 4}, \quad (2.33)$$

As matrizes L e Λ satisfazem,

$$\begin{aligned} gL^T g &= -L, \\ (gL)^T &= -gL. \end{aligned} \quad (2.34)$$

o que permite inferir que L deve ser simétrica no setor temporal, $L_{0i} = L_{i0}$, e antisimétrica no

setor espacial, $L_{ij} = -L_{ji}$, além de ter traço nulo, ou seja,

$$L = \begin{pmatrix} 0 & L_{01} & L_{02} & L_{03} \\ L_{10} & 0 & L_{12} & L_{13} \\ L_{20} & -L_{21} & 0 & L_{23} \\ L_{30} & -L_{31} & -L_{32} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Os elementos da primeira coluna e da primeira linha são simétricos e correspondem aos boosts, enquanto o restante corresponde às rotações no espaço. Podemos agora determinar os geradores, começando pelos geradores de boosts a partir da expressão

$$K_i = -i \frac{\partial \Lambda_{Boosts}}{\partial \theta}, \quad (2.36)$$

com

$$K_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Para as rotações espaciais usamos a mesma relação dada em (2.36) com a diferença que agora usamos as matrizes de rotação $\Lambda_{rotação}$, obtendo assim

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Podemos generalizar Λ_{Boosts} e $\Lambda_{rotação}$ para boosts em uma direção arbitrária dada pelo vetor $\boldsymbol{\beta}$ e para rotação em torno de eixo qualquer, \mathbf{n} , respectivamente, dados por

$$\Lambda_{Boosts}(\boldsymbol{\beta}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\Theta}}, \quad (2.39)$$

$$\Lambda_{rotação}(\theta) = e^{i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta}, \quad (2.40)$$

com

$$\boldsymbol{\Theta} = \theta \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\tanh^{-1} \beta) \hat{\boldsymbol{\beta}}. \quad (2.41)$$

Temos assim que uma transformação geral do subgrupo de Lorentz L_+^\uparrow podem ser definidas como

$$\Lambda = \Lambda_{Boosts}(\boldsymbol{\beta}) \Lambda_{rotação}(\theta) \rightarrow \Lambda = e^{i(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\Theta} + \mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta)}. \quad (2.42)$$

Para os geradores K_i e J_i , temos as seguintes relações de comutação

$$\begin{aligned} [K_i, K_j] &= -i\varepsilon_{ijk}J_k, \\ [J_i, K_j] &= i\varepsilon_{ijk}K_k, \\ [J_i, J_j] &= i\varepsilon_{ijk}J_k. \end{aligned} \quad (2.43)$$

As relações de comutação (2.43) podem ser desacopladas usando as seguintes relações

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{J} + i\mathbf{K}), \quad (2.44)$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2}(\mathbf{J} - i\mathbf{K}), \quad (2.45)$$

obtendo as novas relações de comutação

$$\begin{aligned} [A_i, A_j] &= i\varepsilon_{ijk}A_k, \\ [B_i, B_j] &= i\varepsilon_{ijk}B_k, \\ [A_i, B_j] &= 0. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Estas relações de comutação satisfazem a algebra do grupo $SU(2)$, portanto podemos pensar no grupo de Lorentz como um produto tensorial de $SU(2) \otimes SU(2)$.

2.2.1 Representações espinorais do grupo de Lorentz

Estudaremos agora as representações espinorais do grupo de Lorentz e verificaremos que esta representação junto com os subgrupo L_+^\uparrow levam à equação de Dirac. Devido a estrutura $SU(2) \otimes SU(2)$ do subgrupo L_+^\uparrow podemos rotular um par de números quânticos, (j, j') , correspondentes aos autovalores do operador momento angular, com \mathbf{A} associado a j e \mathbf{B} a j' . Para $j' = 0$, $B = 0$ e

$$\mathbf{J} = i\mathbf{K}, \quad \text{com } (j, 0). \quad (2.47)$$

Para $j = 0$, tem-se $A = 0$ e

$$\mathbf{J} = -i\mathbf{K}, \quad \text{com } (0, j'). \quad (2.48)$$

Pela equivalência entre os grupos $SO(3)$ e $SU(2)$ temos que para $\mathbf{J} \rightarrow \frac{\sigma^i}{2}$ estes grupos apresentam a mesma algebra de Lie. Para as relações (2.47) e (2.48) obtemos

$$\mathbf{K} = -i\frac{\sigma}{2}, \quad \text{com } (j, 0), \quad (2.49)$$

$$\mathbf{K} = i\frac{\sigma}{2}, \quad \text{com } (0, j'). \quad (2.50)$$

Para as representações $(j, 0)$ e $(0, j')$ temos dois tipos de espinores: do tipo I, com

$$j = \frac{1}{2}, \left(\frac{1}{2}, 0\right) \rightarrow \mathbf{J} = \frac{\sigma}{2} \rightarrow \mathbf{K} = -i\frac{\sigma}{2}, \quad (2.51)$$

com a seguinte transformação

$$\zeta \rightarrow \zeta' = e^{i(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Theta} + \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta)} \zeta = e^{(i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \boldsymbol{\Theta})} \zeta. \quad (2.52)$$

Para o espinor do tipo II temos

$$j' = \frac{1}{2}, (0, \frac{1}{2}) \rightarrow \mathbf{J} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \rightarrow \mathbf{K} = i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad (2.53)$$

tendo a seguinte transformação

$$\eta \rightarrow \eta' = e^{i(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\Theta} + \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta)} \eta = e^{(-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \boldsymbol{\Theta} + i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta)} \eta, \quad (2.54)$$

com ζ e η sendo os espinores. As transformações (2.52) e (2.54) podem ser escritas como

$$\zeta' = M\zeta, \quad (2.55)$$

$$\eta' = N\eta, \quad (2.56)$$

com

$$M = e^{i(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta - i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \boldsymbol{\Theta})}, \quad (2.57)$$

$$N = e^{i(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta + i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \boldsymbol{\Theta})}. \quad (2.58)$$

Temos que as matrizes M e N pertence ao grupo $SL(2, \mathbb{C})$, possuem determinante 1 e seus 4 elementos são complexos, onde $(j, 0)$ e $(0, j')$ não são equivalentes por N e M não possuir uma transformação de similaridade do tipo

$$N = SMS^{-1}. \quad (2.59)$$

No entanto existe uma outra transformação que é válida, dada por

$$N = \alpha M \alpha^{-1}, \quad (2.60)$$

com

$$\alpha = -i\sigma_2. \quad (2.61)$$

Do que foi obtido vemos que existem dois tipos de espinores, I e II, constituindo a representação espinorial do grupo L_+^\uparrow .

Trabalharemos agora com bi espinor para a obtenção da equação de Dirac. Antes disto devemos falar sobre o operador paridade P que tem como característica a reversão da orientação espacial do eixos coordenados, não valendo esta operação para vetores axiais, que são pseudo-

vetores e não são alterados por esta transformação. Como exemplo de aplicação de P temos

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}, \quad (2.62)$$

$$\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}, \quad (2.63)$$

$$\mathbf{K} \rightarrow -\mathbf{K}, \quad (2.64)$$

$$\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J}, \quad (2.65)$$

não alterando o gerador \mathbf{J} devido à sua natureza axial. Temos também que a operação de paridade pode ser aplicada a espinores do tipo I e II,

$$\zeta \leftrightarrow \eta. \quad (2.66)$$

Temos que a operação de paridade cria uma correspondência direta entre as representações $(0, \frac{1}{2})$ e $(\frac{1}{2}, 0)$. Podemos assim fazer um tratamento unificado dos espinores ζ e η pelo uso de 4-espinores:

$$\psi = \begin{pmatrix} \zeta \\ \eta \end{pmatrix}, \quad (2.67)$$

sendo que ζ e η possuem duas componentes cada. As transformações de Lorentz para os espinores é dada por

$$\psi \rightarrow \psi' = \Lambda \psi, \quad (2.68)$$

onde

$$\Lambda = \begin{pmatrix} e^{i(\frac{\sigma}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta - i\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta)} & 0 \\ 0 & e^{i(\frac{\sigma}{2} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta + i\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta)} \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

Podemos agora construir a equação de Dirac. Consideramos que $\zeta \rightarrow \phi_R$ e $\eta \rightarrow \phi_L$, com R indicando "Right" e L indicando "Left". Consideramos também um boost puro, ou seja, com $\theta = 0$. Temos assim que

$$\phi_R \rightarrow \phi'_R = e^{\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta} \phi_R, \quad (2.70)$$

$$\phi_L \rightarrow \phi'_L = e^{-\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta} \phi_L. \quad (2.71)$$

Trabalhamos inicialmente com (2.70). O termo $e^{\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta}$ pode ser escrito como

$$e^{\frac{\sigma}{2} \cdot \Theta} = \cosh\left(\frac{\Theta}{2}\right) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}}(i \sinh\left(\frac{\Theta}{2}\right)), \quad (2.72)$$

o que leva a

$$\phi'_R = \left[\cosh\left(\frac{\Theta}{2}\right) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}}(\sinh\left(\frac{\Theta}{2}\right)) \right] \phi_R. \quad (2.73)$$

Se considerarmos que

$$\phi_R(0), \text{ representando uma partícula em repouso (p=0),} \quad (2.74)$$

$$\phi_R(p), \text{ representando uma partícula em movimento (p} \neq 0), \quad (2.75)$$

a equação (2.70) pode ser escrita como

$$\phi'_R(p) = \left[\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \sqrt{\frac{\gamma-1}{2}} \right] \phi_R(0) = \left[\sqrt{\frac{E+m}{2m}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \sqrt{\frac{E-m}{2m}} \right] \phi_R(0), \quad (2.76)$$

$$\phi'_R(p) = \left[\frac{E+m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m(E+m)]^{\frac{1}{2}}} \right] \phi_R(0). \quad (2.77)$$

com

$$\cosh \Theta = \gamma, \quad (2.78)$$

$$\sinh \Theta = \gamma\beta,$$

$$\gamma = \frac{E}{m}. \quad (2.79)$$

O mesmo pode ser feito para para (2.71), obtendo

$$\phi'_L(p) = \left[\frac{E+m - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m(E+m)]^{\frac{1}{2}}} \right] \phi_L(0). \quad (2.80)$$

Temos que, para a partícula em repouso, não se pode definir a posição do spin sobre o momento que é nulo, levando a seguinte condição

$$\phi_R(0) = \phi_L(0), \quad (2.81)$$

o que nos dá as seguintes equações:

$$\phi_R(p) = \frac{1}{m} [E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] \phi_L(p), \quad (2.82)$$

$$\phi_L(p) = \frac{1}{m} [E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] \phi_R(p). \quad (2.83)$$

Podemos escrever (2.82) e (2.83) em uma forma matricial

$$\begin{pmatrix} -m & E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_R(p) \\ \phi_L(p) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.84)$$

Podemos escrever a matriz 4×4 de (2.84) da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} -m & E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} = \gamma^0 E + \gamma^i p_i - m \mathbf{1}_{4 \times 4} = \gamma^\mu p_\mu - m. \quad (2.85)$$

Temos assim que, substituindo (2.85) em (2.84) obtemos

$$(\gamma^\mu p_\mu - m) \psi(p) = 0, \quad (2.86)$$

com

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1_{2 \times 2} \\ 1_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.87)$$

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.88)$$

A equação (2.86) é a equação de Dirac, obtida das transformações de espinores $\phi_R(p)$ e $\phi_L(p)$ sob ação do grupo de Lorentz L_+^\uparrow . Para partículas de massa $m = 0$, temos as seguintes equações

$$(E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi_L(p) = 0, \quad (2.89)$$

$$(E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi_R(p) = 0, \quad (2.90)$$

que são as equações de Weyl com $\phi_R(p)$ e $\phi_L(p)$ sendo os espinores de Weyl e caracterizados por serem auto estados do operador helicidade $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, operador que fornece a projeção do spin sobre o momento. Temos que, para $m = 0$, $E = p$, as equações (2.89) e (2.90) ficam escritas como

$$(E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi_L(p) = 0 \rightarrow (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \phi_L(p) = -\phi_L(p), \quad (2.91)$$

$$(E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi_R(p) = 0 \rightarrow (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \phi_R(p) = \phi_R(p), \quad (2.92)$$

de onde vemos que $\phi_R(p)$ tem helicidade $+1$, enquanto $\phi_L(p)$ possui helicidade -1 .

2.3 Quebra espontânea de simetria: potencial ϕ^4

Assim como existem sistemas simétricos na natureza, a quebra das simetrias é um fenômeno que também se mostra presente em vários sistemas físicos. A chamada quebra espontânea de simetria ocorre quando o sistema físico passa a exibir uma outra configuração após esta quebra, como na transição de fase do ferromagnetismo do modelo de Ising, onde se observa a geração de uma magnetização \mathbf{M} (em direção aleatória) quando a temperatura do material é reduzida abaixo da chamada temperatura crítica. A direção do vetor \mathbf{M} passa então a designar uma direção preferencial, o que implica na quebra da isotropia espacial após a transição de fase [10], [17]. A quebra espontânea de simetria ocorre também na física de partículas, onde o mecanismo de Higgs é responsável por gerar massa para as partículas do modelo padrão, associada ao valor esperado no vácuo do campo escalar. Na quebra espontânea de simetria o vácuo ou o estado fundamental do sistema trabalhado não compartilha a simetria deste, ou seja, não permanece invariante pela simetria da lagrangeana dada. Em resumo, numa quebra espontânea de simetria, um sistema, inicialmente simétrico, sofre uma transição de fase, tornando-se menos simétrico e passando a manifestar os efeitos da quebra de simetria. Uma outra forma de considerar violação de simetrias é partindo de lagrangeanas que já contêm, de início, em seu bojo, os termos de quebra da simetria. Neste caso, dizemos que a quebra de simetria ocorre de forma explícita.

No próximo capítulo, apresentaremos alguns elementos do Modelo Padrão Estendido de Kos-telecky & Colladay, uma extensão do Modelo Padrão (MP), gerada através da inclusão de tensores de violação da simetria de Lorentz na lagrangeana do MP. Em sua concepção, tais tensores são gerados através de uma quebra espontânea de simetria de Lorentz, que ocorre numa teoria de campos primordial, na escala de altíssimas energias (escala de Planck). Após tal quebra, tais tensores, gerados como valores esperados no vácuo, são acoplados aos campos físicos do MP, formatando uma lagrangeana com quebra explícita da simetria de Lorentz. Parte desta lagrangeana, atinente aos setores fotônico e fermiônico, será apresentada no próximo capítulo.

Para uma visualização melhor de como ocorre a quebra espontânea de simetria, usaremos o modelo com potencial ϕ^4 , exemplo geralmente abordado em teoria clássica de campos [22], onde consideramos um sistema com campo escalar ϕ real, definido pela seguinte lagrangeana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - V(\phi), \quad (2.93)$$

com

$$V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\phi^4, \quad (2.94)$$

sendo $\lambda > 0$ e \mathcal{L} é invariante sob a operação de simetria

$$\phi \rightarrow -\phi. \quad (2.95)$$

A energia total relacionada a este modelo é dada por

$$E = \int \left(\frac{1}{2}(\partial_0\phi)^2 + \frac{1}{2}(\partial_i\phi)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\phi^4 \right) d^3x, \quad (2.96)$$

de onde queremos obter o estado fundamental, ou seja, uma configuração de campo ϕ com mínimo de energia. No estado fundamental temos que ϕ é independente do tempo e homogêneo no espaço, ou seja,

$$\partial_0\phi = 0, \quad (2.97)$$

$$\partial_i\phi = 0, \quad (2.98)$$

restando apenas a análise das derivadas primeiras e segundas do potencial $V(\phi)$. Fazemos a primeira derivada, dada por

$$\frac{dV(\phi)}{d\phi} = \phi(m^2 + \lambda\phi^3) = 0, \quad (2.99)$$

que fornece os seguintes pontos de extremização:

$$\phi_1 = 0, \quad (2.100)$$

$$(\phi_2)^2 = -\frac{m^2}{\lambda}. \quad (2.101)$$

Como $\lambda > 0$ devemos analisar os caso para o qual $m^2 \geq 0$ e $m^2 < 0$. Começando pelo primeiro caso ($m^2 \geq 0$), temos que $\phi_1 = 0$ constitui o único ponto extremo, pois de acordo com a Eq.

(2.101), ϕ_2 se torna imaginário, contradizendo a definição anterior de que os campos são reais. Realizando a segunda derivada do potencial, avaliada sobre no ponto ϕ_1 , obtemos,

$$\left(\frac{d^2V(\phi)}{d\phi^2}\right)_{\phi=\phi_1} = m^2 + 3\lambda\phi_1^2 = m^2 \geq 0. \quad (2.102)$$

Vemos então que ϕ_1 é um ponto de mínimo, como visto na Fig. (2.1), sendo compatível com a simetria da lagrangeana sob a transformação (2.95).

Vamos agora examinar a condição $m^2 < 0$. Neste caso, a segunda derivada do potencial, ao ser avaliada no extremo $\phi_1 = 0$, fornece

$$\left(\frac{d^2V(\phi)}{d\phi^2}\right)_{\phi=\phi_1} = m^2 + 3\lambda\phi_1^2 = m^2 < 0, \quad (2.103)$$

mostrando que agora se trata de um ponto de máximo. No segundo ponto de extremização, dado na Eq. (2.101), a derivada segunda vale:

$$\left(\frac{d^2V(\phi)}{d\phi^2}\right)_{\phi=\phi_2} = m^2 + 3\lambda\phi_2^2 = -2m^2 > 0, \quad (2.104)$$

o que configura condição de mínimo de potencial. Tal condição, na verdade, demarca dois pontos sobre o eixo do campo ϕ , dados abaixo:

$$\phi_{2\pm} = \pm \frac{u}{\lambda}, \quad (2.105)$$

onde foi feito $u^2 = -m^2 > 0$. Vemos que os pontos (2.105) representam o estado fundamental do campo ϕ . A Fig. (2.1) ilustra o perfil do potencial $\lambda\phi^4$. As excitações desta teoria, definidas em torno do estado de vácuo, não são invariantes sob operação a $\phi \rightarrow -\phi$, configurando a quebra de simetria espontânea do modelo em questão. Maiores detalhes sobre esse processo podem ser encontrados no capítulo 5 da Ref. [22].

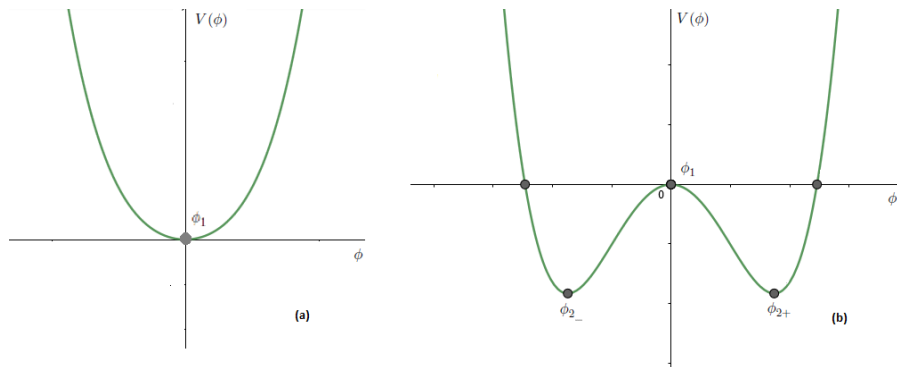


Figura 2.1: Gráfico para os valores de vácuo do modelo ϕ^4 onde foi considerado para (a) e (b), respectivamente, as condições $m \geq 0$ e $m < 0$.

3 *Violação da simetria de Lorentz e Modelo Padrão Estendido*

É fato conhecido que a simetria de Lorentz é a simetria subjacente da teoria da relatividade restrita e uma baliza fundamental das modernas teorias quântico-relativísticas. A violação de simetria de Lorentz (VSL) foi proposta por Kostelecky e Samuel inicialmente no contexto de Teoria de Cordas [26], num regime de altíssimas energias, nas proximidades da escala de Planck. Neste regime, existe a possibilidade da quebra espontânea da simetria de Lorentz, que ao ocorrer, gera valores esperados no vácuo de quantidades tensoriais. Tais quantidades atuam como campos de fundo (de natureza tensorial), fixos no espaço-tempo, que então se acoplam aos campos físicos do Modelo Padrão (MP). Os termos de acoplamento campo-de-fundo-campo-físico são aqueles que são adicionados à estrutura do MP usual, compondo assim o chamado Modelo Padrão Estendido (MPE) [4]. É também conhecido que os termos de VSL podem ou não violar a simetria CPT, de modo que podem ser classificados em termos CPT-pares ou CPT-ímpares. Este modelo constitui o principal arcabouço teórico para avaliar as consequências da violação da simetria de Lorentz na atualidade, em todos os setores do MP, incluindo fótons, férmions, léptons e hádrons. De outra forma, podemos dizer que há termos de VSL nos setores eletromagnético e de Dirac, podendo também ser inseridos na teoria eletrofraca de Weinberg-Salam e na interação forte dos quarks e hádrons (cromodinâmica quântica). A VSL implica no aparecimento de direções privilegiadas no espaço-tempo, que conferem comportamentos anisotrópicos aos sistemas físicos considerados.

O MPE preserva diversas propriedades importantes do MP, como a conservação da energia e do momento (invariância translacional do espaço-tempo), a simetria de calibre dos setores eletromagnético, eletrofraco e forte, $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$, a renormalização das interações (em sua versão mínima). Preserva também a simetria de Lorentz do ponto de vista do referencial do observador. Como se sabe, existem dois tipos de transformações de Lorentz: a transformação do observador e da partícula. Na transformação do observador, o campo de fundo se transforma covariantemente, como um vetor ou tensor genuíno, de modo que os termos constituídos como contrações tensoriais com os campos físicos, resultam em escalares de Lorentz. Seja $K_{\mu\nu}$ um tensor de VSL, fixo no espaço-tempo, pertencente à estrutura do MPE. Ao ser contraído com o campo eletromagnético, forma a seguinte estrutura invariante de calibre e invariante de Lorentz: $K_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. São termos deste tipo que compõem a lagrangeana do MPE. No entanto, sob a transformação

no referencial das partículas, o campo de fundo não se transforma como vetor ou tensor genuíno, gerando contrações tensoriais que não são invariantes de Lorentz.

A densidade lagrangeana do MPE pode ser escrito como

$$\mathcal{L}_{MPE} = \mathcal{L}_{MP} + \mathcal{L}_{LV} + \dots, \quad (3.1)$$

onde \mathcal{L}_{MP} corresponde à densidade lagrangeana do MP mínimo e \mathcal{L}_{LV} representa os termos de violação de Lorentz e CPT, composta por escalares de Lorentz, no referencial do observador, constituídos por contrações entre os tensores de VSL e os campos físicos. A seguir, vamos apresentar alguns elementos essenciais do setor de fótons e setor de férmions do MPE.

3.1 Setor eletromagnético do MPE

Podemos começar apresentando os termos de VSL no setor $U(1)$ eletromagnético

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{4}\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}(K_{AF})^\mu A^\nu F^{\alpha\beta} - \frac{1}{4}(K_F)_{\mu\nu\alpha\beta}F^{\mu\nu}F^{\alpha\beta}, \quad (3.2)$$

onde $F_{\mu\nu}$ é o tensor do campo eletromagnético, A^ν é o 4-potencial que representa o campo eletromagnético, $(K_{AF})^\mu = ((K_{AF})_0, (K_{AF})^i)$ é um campo vetorial de fundo CPT-ímpar, e $(K_F)_{\mu\nu\alpha\beta}$ é o campo tensorial de fundo CPT-par, que possui 19 termos independentes. A eletrodinâmica CPT-ímpar, constituída pelo termo $\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}(K_{AF})^\mu A^\nu F^{\alpha\beta}$, foi primeiramente estudada por Carroll-Field-Jackiw [23], sendo regida pela seguinte lagrangeana:

$$\mathcal{L}_{odd} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{4}\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}(K_{AF})^\mu A^\nu F^{\alpha\beta} - A_\mu J^\mu, \quad (3.3)$$

podendo ser escrita também na forma de componentes, fazendo $(K_{AF})^\mu = V^\mu$,

$$\mathcal{L}_{odd} = -\frac{1}{4}(2F_{0i}F^{0i} + F_{ij}F^{ij}) - \frac{1}{4}\left[\epsilon_{0ilm}V^0A^iF^{lm} + \epsilon_{i0lm}V^iA^0F^{lm} + 2\epsilon_{il0m}V^iA^lF^{0m}\right], \quad (3.4)$$

ou ainda,

$$\mathcal{L}_{odd} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) + \frac{1}{2}[V^0(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) - A^0(\mathbf{V} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{V} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{E})], \quad (3.5)$$

onde usamos $\epsilon_{0123} = 1 = -\epsilon^{0123}$, e

$$F_{0i} = E^i, \quad F_{lm} = \epsilon_{lmk}B_k, \quad (3.6)$$

sendo E^i e B^i as componentes do campo elétrico e magnético, respectivamente.

Usando a equação de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\lambda} - \partial_\sigma \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\sigma A_\lambda)} = 0, \quad (3.7)$$

obtemos a equação de movimento,

$$\partial_\nu F^{\nu\alpha} + (K_{AF})_\beta \tilde{F}^{\alpha\beta} = J^\alpha, \quad (3.8)$$

onde $\tilde{F}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\epsilon^{\alpha\beta\mu\nu}F_{\mu\nu}$ é o tensor dual do campo eletromagnético. As equações de Maxwell modificadas são

$$\nabla \cdot \mathbf{E} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{B} = \rho, \quad (3.9)$$

$$-\partial_t \mathbf{E} + \nabla \times \mathbf{B} - V_0 \mathbf{B} + \mathbf{V} \times \mathbf{E} = \mathbf{J}. \quad (3.10)$$

A lagrangeana CPT-par foi estudada em detalhes na Ref. [28], sendo dada por

$$\mathcal{L}_{even} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{4}(K_F)_{\mu\nu\alpha\beta}F^{\mu\nu}F^{\alpha\beta} - A_\mu J^\mu, \quad (3.11)$$

O tensor $(K_F)_{\mu\nu\alpha\beta}$ tem as simetrias do tensor de Riemann

$$(K_F)_{\alpha\beta\rho\varphi} + (K_F)_{\alpha\rho\varphi\beta} + (K_F)_{\alpha\varphi\beta\rho} = 0, \quad (3.12)$$

$$(K_F)_{\alpha\nu\rho\varphi} = -(K_F)_{\nu\alpha\rho\varphi}, (K_F)_{\alpha\nu\rho\varphi} = -(K_F)_{\alpha\nu\varphi\rho}, (K_F)_{\alpha\nu\rho\varphi} = (K_F)_{\rho\varphi\alpha\nu}, \quad (3.13)$$

e um duplo traço nulo

$$(K_F)^{\rho\varphi}{}_{\rho\varphi} = 0. \quad (3.14)$$

Assim, este tensor possui 19 componentes independentes, 9 das quais não geram birrefringência. Esta lagrangeana pode ser escrita em termos das componentes dos campos elétrico e magnético, ou seja,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{even} = & -\frac{1}{4}(2F_{0i}F^{0i} + F_{ij}F^{ij}) - \frac{1}{4}\left[4(K_F)_{0i0j}F^{0i}F^{0j} + 2(K_F)_{0ilm}F^{0i}F^{lm} \right. \\ & \left. + (K_F)_{ablm}F^{ab}F^{lm}\right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Usando as relações (3.6), a (3.15) resulta em

$$\mathcal{L}_{even} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) - \frac{1}{4}\left[4(K_F)_{0i0j}E^iE^j + 2(K_F)_{0ilm}\epsilon_{lmp}E^iB^p + (K_F)_{ablm}\epsilon_{abq}\epsilon_{lmp}B_qB_p\right], \quad (3.16)$$

ou melhor,

$$\mathcal{L}_{even} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) + \frac{1}{2}\left[(\kappa_{DE})_{ij}E^iE^j + (\kappa_{DB})_{ip}E^iB^p - (\kappa_{HB})_{qp}B^qB^p\right], \quad (3.17)$$

onde escrevemos as componentes do tensor (K_F) em termos de 4 matrizes 3×3 ,

$$(\kappa_{DE}), (\kappa_{HB}), (\kappa_{DB}), (\kappa_{HE}). \quad (3.18)$$

onde

$$(K_F)_{0j0k} = -\frac{1}{2}(\kappa_{DE})_{jk}, \quad (3.19)$$

$$(K_F)_{0ilm} \epsilon_{lmp} = (\kappa_{DB})_{ip}, \quad (3.20)$$

$$(K_F)_{ablm} \epsilon_{abq} \epsilon_{lmp} = 2(\kappa_{HB})_{qp}. \quad (3.21)$$

Sabemos que o campo elétrico é ímpar sob paridade ($\mathbf{E} \rightarrow -\mathbf{E}$), enquanto o campo magnético é par ($\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}$). Desta forma, as matrizes (κ_{DE}) e (κ_{HB}) são pares sob paridade, enquanto as matrizes (κ_{DB}) e (κ_{HE}) são P -ímpares.

3.2 Setor fermiônico no MPE

O setor fermiônico do MPE foi inicialmente desenvolvido por Colladay e Kostelecky na Ref. [3], consistindo na implementação de termos CPT-pares e CPT-ímpares e violadores da simetria de Lorentz, na teoria de Dirac, mantendo a estrutura de calibre e renormalização da teoria. A densidade lagrangeana para o setor fermiônico é dada por

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \bar{\psi} \Gamma^\nu \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi - \bar{\psi} M \psi, \quad (3.22)$$

sendo ψ o espinor de Dirac, e

$$\Gamma^\nu = \gamma^\nu + c^{\mu\nu} \gamma_\mu + d^{\mu\nu} \gamma_5 \gamma_\mu + e^\nu + i f^\nu \gamma_5 + \frac{1}{2} g^{\lambda\mu\nu} \sigma_{\lambda\mu}, \quad (3.23)$$

$$M = m + a^\mu \gamma_\mu + b^\nu \gamma_5 \gamma^\mu + \frac{1}{2} H_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu}. \quad (3.24)$$

As quantidades tensoriais $g^{\lambda\mu\nu}$, $c^{\mu\nu}$, $d^{\mu\nu}$, e^ν , f^ν , a^μ , b^ν , $H_{\mu\nu}$ representam os campos de fundo que estão acoplados aos campos físicos e que violam CPT e a simetria de Lorentz no referencial das partículas. Estes termos estão inseridos na lagrangeana (3.22) de forma explícita. Os termos em (3.23) são adimensionais enquanto os termos em (3.24) possuem dimensão de massa igual a 1, ou seja,

$$[\gamma^\nu] = [c^{\mu\nu}] = [d^{\mu\nu}] = [e^\nu] = [f^\nu] = [g^{\lambda\mu\nu}] = 0, \quad (3.25)$$

$$[a^\mu] = [b^\nu] = [H_{\mu\nu}] = 1. \quad (3.26)$$

Podemos escrever a lagrangeana de Dirac na sua forma extensa,

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i}{2} \left(\bar{\psi} \gamma^\nu \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi + c^{\mu\nu} \bar{\psi} \gamma_\mu \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi + d^{\mu\nu} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi + e^\nu \bar{\psi} \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi + i f^\nu \bar{\psi} \gamma_5 \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} g^{\lambda\mu\nu} \sigma_{\lambda\mu} \overleftrightarrow{\partial}_\nu \psi \right) - \bar{\psi} m \psi - a^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi - b^\nu \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^\mu \psi - \frac{1}{2} \bar{\psi} H_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu} \psi. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Da equação de Euler-Lagrange, obtemos a equação de Dirac modificada com os termos de

violação,

$$(i\Gamma^\nu \partial_\nu - M) \psi = 0. \quad (3.28)$$

Quanto à questão da violação da simetria CPT, a lagrangeana (3.22) contém termos CPT-pares e CPT-ímpares. Portanto, nem todos os termos que violam a simetria de Lorentz, violam a simetria CPT. Os termos de violação de rank-1 ou rank-3 ($a^\mu, b^\mu, e^\mu, f^\mu, g^{\lambda\mu\nu}$) são CPT-ímpares, enquanto aqueles de rank-2 ($c^{\mu\nu}, d^{\mu\nu}, H_{\mu\nu}$) são CPT-pares. O número de índice par ou ímpar indica termos CPT-pares ou ímpares.

Um detalhe importante é que nem todos termos na lagrangeana (3.22) violam de fato a simetria de Lorentz. O ponto é que alguns termos de violação são absorvidos sob uma redefinição dos campos, caso do termo $a^\mu \gamma_\mu$. Considerando a densidade de Lagrangeana de Dirac modificada pelo termo $\bar{\psi} a_\mu \gamma^\mu \psi$,

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\bar{\psi} \psi - a_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi, \quad (3.29)$$

ao implementar a redefinição espinorial,

$$\psi \rightarrow e^{-ia_\mu x^\mu} \psi, \quad (3.30)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu (e^{-ia_\mu x^\mu} \psi) - m\bar{\psi} \psi - a_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi, \\ \mathcal{L} &= \bar{\psi} \gamma^\mu a_\mu \psi + i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\bar{\psi} \psi - a_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi, \\ \mathcal{L} &= i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\bar{\psi} \psi, \end{aligned} \quad (3.31)$$

recuperando a densidade lagrangeana de Dirac inicial convencional, sem os termos de violação. Uma análise aprofundada sobre a redefinição de campos é encontrada na Ref. [5], que apresenta mais detalhes sobre os termos falso-violantes do setor fermiônico.

O termo de VSL, cujos efeitos serão avaliados neste trabalho em um sistema típico da física da matéria condensada, é o campo de fundo b^μ , presente na estrutura axial, $\bar{\psi} b_\mu \gamma_5 \gamma^\mu \psi$, e que leva à seguinte equação de Dirac modificada:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - b^\mu \gamma_5 \gamma^\mu - m) \psi = 0. \quad (3.32)$$

Assim como foi obtida no Apêndice A a relação de dispersão e as soluções espinoriais de onda plana para a equação de Dirac pura, podemos fazer o mesmo para a Eq. (3.32). Para isto, iniciamos com a eq (3.32) escrita no espaço dos momentos,

$$(\gamma^\mu p_\mu - b_\mu \gamma_5 \gamma^\mu - m) \psi = 0, \quad (3.33)$$

$$(\not{p} - \gamma_5 \not{b} - m) \psi = 0. \quad (3.34)$$

Multiplicando a Eq. (3.34) pelo operador

$$(\not{p} - \gamma_5 \not{b} + m), \quad (3.35)$$

obtemos

$$[p^2 - m^2 - b^2 + \gamma_5 (\not{p}\not{b} - \not{b}\not{p})] \psi = 0, \quad (3.36)$$

onde usamos $\not{p}\not{p} = p^2$. Por fim, multiplicando (3.36) por

$$[p^2 - m^2 - b^2 - \gamma_5 (\not{p}\not{b} - \not{b}\not{p})], \quad (3.37)$$

usando

$$\not{p}\not{b} + \not{b}\not{p} = 2(p \cdot b), \quad (3.38)$$

encontramos a relação de dispersão desta teoria,

$$(p^2 - m^2 - b^2)^2 + 4p^2 b^2 - 4(p \cdot b)^2 = 0. \quad (3.39)$$

Para obtermos as energias podemos considerar, separadamente, o caso em que o campo de fundo b^μ é puramente tipo-tempo, $b^\mu = (b_0, 0)$, ou puramente tipo-espaço, $b^\mu = (0, \mathbf{b})$. As energias, respectivamente, para estes dois casos, são dadas por

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 + b_0^2 \pm 2b_0 |\mathbf{p}|}, \quad (3.40)$$

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 + \mathbf{b}^2 \pm 2(m^2 \mathbf{b}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{p})^2)^{1/2}}. \quad (3.41)$$

As soluções espinorais podem ser encontradas fazendo-se a seguinte definição para o 4-espinor ψ :

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

onde φ_1 e φ_2 são bi-espinores. Inserindo (3.42) na eq. (3.33) e, sabendo que (3.33), pode ser escrita como

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - E + m\gamma_0 - b_0\gamma_5 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \psi = 0, \quad (3.43)$$

temos que, ao escrever os termos de (3.43) na forma matricial, esta equação fornece duas equações espinorais acopladas

$$(E - m - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \varphi_1 + (b_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi_2 = 0, \quad (3.44)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0) \varphi_1 + (-E - m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \varphi_2 = 0. \quad (3.45)$$

Podemos resolver as Eqs. (3.44) e (3.45) de modo a deixar φ_1 em função de φ_2 e φ_2 em função

de φ_1 da seguinte forma:

$$\varphi_1 = \frac{1}{W_2^2} [(E - m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E - m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})] \varphi_2, \quad (3.46)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{W_1^2} [(E + m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E + m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})] \varphi_1, \quad (3.47)$$

com $\mathbf{d} = \mathbf{b} \times \mathbf{p}$, e

$$W_1^2 = (E + m)^2 - \mathbf{b}^2, \quad (3.48)$$

$$W_2^2 = (E - m)^2 - \mathbf{b}^2. \quad (3.49)$$

Pela equação de Dirac, observando o 4-espinor ψ , podemos escrever suas soluções espinoriais genericamente na seguinte forma:

$$\psi = N \begin{pmatrix} U \\ B_2 U \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

com N sendo a constante de normalização, $\varphi_1 = U$, e B_2 sendo o operador matricial dado por:

$$B_2 = \frac{1}{W_1^2} [(E + m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E + m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})]. \quad (3.51)$$

Retornaremos à questão das soluções de partícula livre deste modelo no capítulo 5 desta dissertação.

Desde a formulação do MPE, muitos trabalhos foram e continuam sendo desenvolvidos a respeito da quebra de simetria de Lorentz e CPT. Na Ref. [4], elementos básicos do MPE foram analisados, mostrando que algumas características importantes das teorias de campos usuais permanecem inalteradas, tais como a conservação de energia-momento e invariância translacional, a invariância de calibre, a covariância no referencial do observador. É também esperado a positividade de energia, e preservação da causalidade, etc... Na Ref. [1], a estabilidade e causalidade são preservadas.

Além destes trabalhos, podemos destacar outros, que visam restringir os valores dos campos de fundo de acordo com dados experimentais conhecidos. No trabalho [15] é mostrado que no limite não relativístico o campo de fundo a^μ não contribui para efeitos quantitativos dos níveis de energia do hidrogênio, diferente do termo b^μ em que há uma contribuição. A Ref. [19] explora os efeitos da violação das simetrias de Lorentz e CPT na espectroscopia do hidrogênio e do anti-hidrogênios analisando as transições 1S-2S e transições hiperfinas, podendo assim estabelecer limites superiores sobre a magnitude dos campos de fundo. Um outro trabalho [18], investigou os efeitos de violação CPT sobre a física do momento magnético anômalo, no contexto de eletrodinâmica quântica. Podemos citar também o trabalho [18] que envolve os dados sobre a estrutura hiperfina do múon e o seu momento magnético anômalo, usando-os para restringir com mais precisão a magnitude dos campos de fundo.

Os efeitos dos termos de violação de simetria podem ser discutidos também no contexto de

sistemas de matéria condensada (grafenos, redes ópticas etc), como proposto pelo trabalho [29], onde se analisa o tunelamento de Klein para a equação de Dirac modificada pelo campo de fundo b^μ . No presente trabalho, como pode ser visto nos próximos capítulos, realizaremos um estudo da equação de Dirac modificada pelo termo de campo de fundo b^μ sobre o modelo de Kronig-Penney sobre uma rede cristalina unidimensional, da qual analisaremos as relações de bandas de energia devido a introdução deste termo.

3.2.1 Limite não relativístico para o setor fermiônico do MPE

O estudo do limite não relativístico de uma teoria relativística é de grande interesse, pois é esperado que neste regime a teoria possa fornecer resultados já conhecidos de uma teoria quântica, além de permitir estudar sistemas quânticos sem que seja descartado os efeitos relativísticos. Um exemplo deste procedimento, usual em livros de mecânica quântica relativística, é o caso da equação de Pauli, obtida quando fazemos o limite não relativístico da equação de Dirac na presença de um campo eletromagnético externo, ou seja, quando consideramos $\mathbf{p}^2 \ll m^2$, $eA_0 \ll m$, obtemos a equação de Pauli, que é a equação de Schrödinger com o termo de interação magnética ($\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$). Da equação de Pauli, vemos que o fator giromagnético de spin é dado por $g_s = 2$, o dobro do valor do fator giromagnético orbital ($g_l = 1$), explicado primeiramente pela teoria de Dirac.

O caso do limite não relativístico do setor fermiônico foi abordado na Ref. [27], fornecendo o seguinte Hamiltoniano não relativístico:

$$H_{NR} = \frac{p^2}{2m} + A + B_j \sigma^j + C_j \frac{p_j}{m} + D_{jk} \frac{p_j \sigma^k}{m} + E_{jk} \frac{p_j p_k}{m^2} + F_{jkl} \frac{p_j p_k \sigma^l}{m^2} + G_{jkl} \frac{p_j p_k p_l}{m^3} + I_{jklm} \frac{p_j p_k p_l \sigma^m}{m^3}, \quad (3.52)$$

onde os coeficientes de VSL, que surgem do limite não relativístico do setor fermiônico do MPE, estão dados abaixo:

$$A = a_0 + -mc_{00} - me_0, \quad (3.53)$$

$$B_j = -b_j + md_{j0} - \frac{1}{2}m\varepsilon_{jkl}g_{kl0} + \frac{1}{2}\varepsilon_{jkl}H_{kl}, \quad (3.54)$$

$$C_j = -a_j + m(c_{0j} + c_{j0}) + me_j, \quad (3.55)$$

$$D_{jk} = b_0\delta_{jk} - m(d_{jk} + d_{00}\delta_{jk}) - m\varepsilon_{klm} \left(\frac{1}{2}g_{mlj} + g_{m00}\delta_{jl} \right) - \varepsilon_{jkl}H_{l0}, \quad (3.56)$$

$$E_{jk} = m \left(-c_{jk} - \frac{1}{2}c_{00} \right), \quad (3.57)$$

$$F_{jkl} = \left[m(d_{0j} + d_{j0}) - \frac{1}{2} \left(b_j + md_{j0} + \frac{1}{2}m\varepsilon_{jkl}g_{mn0} + \frac{1}{2}\varepsilon_{jkl}H_{mn} \right) \right] \delta_{kl} + \frac{1}{2} \left(b_l + \frac{1}{2}m\varepsilon_{jkl}g_{mn0} \right) \delta_{jk} - m\varepsilon_{jkl} (g_{m0k} + g_{m0k0}), \quad (3.58)$$

$$G_{jkl} = \frac{1}{2} (a_j \delta_{kl} - m e_j \delta_{kl}), \quad (3.59)$$

$$I_{jklm} = \frac{1}{2} \left[(-b_0 \delta_{jm} + m d_{mj} + \varepsilon_{jmn} H_{n0}) \delta_{kl} + \left(-m d_{jk} - \frac{1}{2} m \varepsilon_{knp} g_{npj} \right) \delta_{lm} \right]. \quad (3.60)$$

O Hamiltoniano (3.52) constitui ponto de partida para possíveis estudos da violação da simetria de Lorentz em sistemas quânticos da matéria condensada, como na Ref. [13], que examina efeitos da violação de Lorentz na mecânica quântica não relativística, especificamente conectadas com correspondências com as interações spin-órbita do tipo Rashba e Dresselhaus. Na Ref. [12], examina-se a interação spin-órbita Rashba, que possui vasta aplicação em spintrônica. Verifica-se que ao considerar o termo $H_{\mu\nu}$ na equação de Dirac em seu limite não relativístico, constatamos que existe uma relação entre o termo de violação de Lorentz com a interação spin-órbita tipo Rashba. Na Ref. [21], é realizada uma análise do termo de violação de Lorentz do setor fermiônico na presença de um termo CPT-par, $\bar{\psi} d^{\mu\nu} \gamma_5 \gamma_\mu \psi$. No regime não relativístico, é analisado o problema de fases geométricas em elétrons confinados em anéis unidimensionais, sendo demonstrado que os coeficientes de violação da simetria de Lorentz podem gerar fases geométricas (na ausência de campo eletromagnético), similares àquelas produzidos pela interação Rashba e Dresselhaus nestes sistemas.

Assim como apresentamos elementos principais dos setores fotônico e fermiônico do MPE, as lagrangeanas do setor eletrofraco e do setor forte, envolvendo campos com estrutura de calibre não Abeliana, podem também ser discutidas. Vide Refs. [3], [4], [26]. Como tais termos não serão abordados nesta dissertação, não serão apresentados.

4 *Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) quântico e quântico-relativístico*

Sabe-se que o modelo de elétrons livres explica muito das propriedades físicas da matéria condensada, tais como capacidade térmica, condutividade térmica, susceptibilidade magnética etc. No entanto este modelo não explica outras propriedades ou características dos sólidos, tais como a diferença entre condutores, semicondutores e isolantes, a existência de valores positivos para o coeficiente Hall, etc... [11]. Faz-se assim necessário o desenvolvimento de um novo modelo que explique tais propriedades, conhecido como modelo de elétrons quase livres, na presença de uma rede periódica em um cristal ou um sólido. Esta rede geralmente apresenta simetria de translação entres seus pontos e cada ponto pode ser identificado como um íon. Temos assim que, no modelo de elétrons quase livres, devemos levar em consideração a interação dos elétrons de condução com potenciais periódicos característicos da sucessão de íons que compõem a rede cristalina.

Como sabemos, os elétrons em um cristal estão organizados em bandas de energia e o modelo de elétrons quase livres afirma que estas bandas estão separadas por faixas proibidas de energia, região, no espaço das energias, que nenhum elétron pode ocupar. A explicação para um sólido ser isolante, condutor ou semicondutor, está no fato de uma banda de energia ter seus estados completamente preenchidos ou quase preenchidos, como pode ser visto na Fig.(4.1).

Neste capítulo, abordaremos o modelo de Kronig-Penney, quântico (com potencial δ e potencial tipo degrau) e quântico-relativístico, para uma rede cristalina unidimensional. Este modelo leva em conta a presença de potenciais periódicos, característicos do modelo de elétrons quase livres. Como principal objetivo, queremos encontrar as relações de banda de energia para este modelo no contexto de equação de Schrödinger e de Dirac.

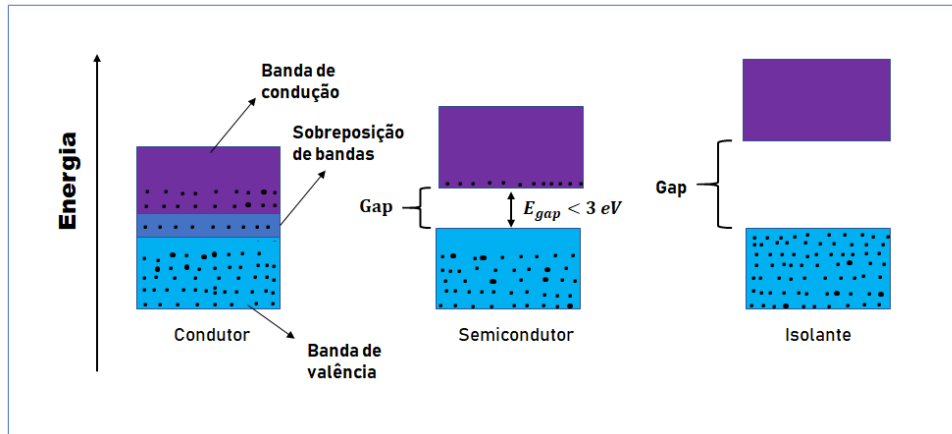


Figura 4.1: Gráfico esquemático para os níveis de energia de metais, semi-metais, e semi-condutores. Retirado da Ref. [11]

4.1 Potenciais periódicos na equação de Schrodinger

A maioria dos metais apresenta uma estrutura cristalina composta por íons que estão organizados de forma periódica em sua rede cristalina. Esta periodicidade espacial faz com que o metal apresente simetrias, como a simetria translacional, com tal periodicidade levando às chamadas bandas de energia, que são regiões onde os elétrons ocupam determinados estados de energia, como foi mencionado no início do capítulo. Junto com as bandas de energia, a periodicidade acarreta no aparecimento dos "gaps", que são regiões proibidas para os elétrons e que separam as regiões de bandas permitidas. A fim de estudar estes metais e encontrar uma relação para as bandas de energia, consideramos o modelo de Kronig-Penney que introduz potenciais periódicos na equação de Schrödinger. Antes de estudarmos este modelo precisamos compreender como se dá a introdução da periodicidade no formalismo quântico, o que ocorre através do teorema de Bragg.

Cada íon da rede deve contribuir para o potencial ao longo da mesma. Devido à periodicidade da estrutura cristalina, que organiza os íons e átomos do material, o potencial deve apresentar periodicidade, ou seja,

$$V(x + a) = V(x), \quad (4.1)$$

onde a é a constante ou parâmetro de rede. Com o potencial possuindo esta propriedade e, sabendo que o termo de energia cinética não é alterado pela translação $x \rightarrow x + a$, devemos ter que o Hamiltoniano do sistema ($H = K + V$) permaneça invariante sob tal translação, uma vez que $K = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, sendo $\hbar^2 k^2$ o momento da onda. Para regiões sem potencial a solução para partícula

livre é dada por

$$\Psi(x) = e^{ikx}, \quad (4.2)$$

com

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.3)$$

Se fizermos $x \rightarrow x + a$ em (4.2), obtemos

$$\Psi(x + a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika}\Psi(x), \quad (4.4)$$

notando que a função de onda transladada difere da função de onda $\Psi(x)$ por um fator de fase e^{ika} . Tomando o módulo quadrático de (4.4), que é referente à densidade de probabilidade,

$$|\Psi(x + a)|^2 = |\Psi(x)|^2, \quad (4.5)$$

vemos que a densidade de probabilidade permanece invariante ao deslocarmos a função de onda de um sítio da rede cristalina para outro, não havendo distinção em fazer medida de um observável em um sítio ou outro, pois são equivalentes por translação.

Podemos tratar de maneira mais formal o que foi explanado acima. Considerando um operador \hat{D}_a que translada uma função por uma distância a , temos

$$\hat{D}_a f(x) = f(x + a). \quad (4.6)$$

A invariância de H quanto à translação leva à comutação dos operadores H e \hat{D}_a , ou seja:

$$[H, \hat{D}_a] = 0. \quad (4.7)$$

Queremos encontrar os autovalores do operador \hat{D}_a quando aplicado em $\Psi(x)$, que satisfaz

$$\hat{D}_a \Psi(x) = \lambda_a \Psi(x). \quad (4.8)$$

Para encontrar o valor de λ_a , fazemos

$$\hat{D}_{-a} \hat{D}_a f(x) = \hat{D}_{-a} f(x + a) = f(x), \quad (4.9)$$

que comparando com

$$\hat{D}_{-a} \hat{D}_a \Psi(x) = \lambda_a \hat{D}_{-a} \Psi(x) = \lambda_a \lambda_{-a} \Psi(x), \quad (4.10)$$

fornece

$$\lambda_a \lambda_{-a} = 1,$$

o que é compatível com

$$\lambda_a = e^{iqa}. \quad (4.11)$$

Pela relação de comutação (4.7), temos que $\Psi(x)$ é autoestado de H e \hat{D}_a . Definindo

$$u(x) = e^{-iqx}\Psi(x), \quad (4.12)$$

temos que

$$\hat{D}_a u(x) = e^{-iq(x+a)}\hat{D}_a \Psi(x) = e^{-iq(x+a)}e^{iqa}\Psi(x) = e^{-iqx}\Psi(x) = u(x), \quad (4.13)$$

notando que $u(x)$ é uma função periódica que se comporta como $u(x+a) = u(x)$. O resultado acima mostra que um autoestado que é autoestado simultâneo de H e \hat{D}_a dever ser da forma

$$\Psi(x) = e^{iqx}u(x), \quad (4.14)$$

com $u(x)$ periódico. Funções com esta periodicidade, são conhecidas como funções Bloch. Temos então que as funções de Bloch são as soluções da equação de Schrödinger para potenciais periódicos.

4.1.1 Modelo de Kronig-Penney com potencial δ

Este modelo consiste em uma série de potenciais tipo função delta, situados em posições x que guardam entre si relações de periodicidade, ou seja, $x = na$, com n sendo um inteiro. O potencial é então escrito como

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda}{2m a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (4.15)$$

com a sendo a constante de rede e λ uma quantidade adimensional. Temos $V(x) = 0$, para $x \neq na$ e a solução será aquela para partícula livre. Propomos que para a região R_n , definida por $(n-1)a \leq x \leq na$, e R_{n+1} , definida em $na \leq x \leq (n+1)a$, as soluções de partículas "livres" sejam dadas, respectivamente, por

$$\Psi_n(x) = A_n \sin k(x - na) + B_n \cos k(x - na), \quad (4.16)$$

$$\Psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin k(x - (n+1)a) + B_{n+1} \cos k(x - (n+1)a). \quad (4.17)$$

A continuidade da função de onda em $x = na$ implica em $\Psi_{n+1}(na) = \Psi_n(na)$, ou seja,

$$-A_{n+1} \sin(kna) + B_n \cos(kna) = B_n. \quad (4.18)$$

A condição de descontinuidade para potenciais tipo delta, $V = V_0\delta(x-a)$, é

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\varepsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\varepsilon} = V_0 \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \delta(x-a).$$

Para o caso atual, em $x = a$, temos

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{a+\varepsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{a-\varepsilon} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \delta(x-a) u(x) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} u(a), \quad (4.19)$$

que pode ser generalizada para $x = a$

$$\left(\frac{d\Psi_{n+1}}{dx}\right)_{na+\varepsilon} - \left(\frac{d\Psi_n}{dx}\right)_{na-\varepsilon} = \frac{\lambda}{a} \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} dx \delta(x-na) \Psi_n(x), \quad (4.20)$$

o que leva a

$$A_{n+1} \cos(ka) + B_{n+1} \sin(ka) - kA_n = \frac{\lambda}{a} B_n \quad (4.21)$$

Podemos escrever os coeficientes A_{n+1} e B_{n+1} em função de A_n e B_n . Para isso multiplicamos (4.18) por $\sin(ka)$ e (4.21) por $(\cos ka)/k$, e fazemos a subtração dos resultados, obtendo

$$A_{n+1} = A_n \cos(ka) + (g \cos(ka) - \sin(ka)) B_n, \quad (4.22)$$

com

$$g = \frac{\lambda}{ka}. \quad (4.23)$$

Para B_n multiplicamos (4.18) por $\cos(ka)$, e (4.21) por $(\sin(ka))/k$. Somamos os resultados, obtendo

$$B_{n+1} = (g \sin(ka) + \cos(ka)) B_n + A_n \sin(ka). \quad (4.24)$$

Reescrevendo (4.16) como

$$\Psi_n(x) = A_n \sin k[(x+a) - (n+1)a] + B_n \cos k[(x+a) - (n+1)a], \quad (4.25)$$

vemos que (4.25) é igual a (4.17) se fizermos $x \rightarrow x+a$ em (4.17). Dado isto, pela exigência do teorema de Bloch, (4.14), obtemos:

$$\Psi(x+a) = e^{iq(x+a)} u(x+a) = e^{iqa} e^{iqx} u(x) = e^{iqa} e^{iqx} u(x) = e^{iqa} \Psi(x), \quad (4.26)$$

ou seja, devemos ter

$$\Psi_{n+1}(x+a) = e^{iqa} \Psi_n(x), \quad (4.27)$$

expressão esta que relaciona as funções de onda nas regiões R_n e R_{n+1} e fornece as seguintes relações entre as amplitudes:

$$A_{n+1} = e^{iqa} A_n, \quad (4.28)$$

$$B_{n+1} = e^{iqa} B_n, \quad (4.29)$$

Substituindo (4.28) e (4.29) em (4.22) e (4.24), obtemos

$$A_n (e^{iqa} - \cos(ka)) = B_n (g \cos(ka) - \sin(ka)), \quad (4.30)$$

$$B_n (e^{iqa} - (g \sin(ka) + \cos ka)) = A_n \sin(ka). \quad (4.31)$$

Para uma solução não trivial, devemos ter A_n e $B_n \neq 0$, o que implica em

$$(e^{iqa} - \cos(ka)) (e^{iqa} - (g \sin(ka) + \cos(ka))) = \sin ka (g \cos(ka) - \sin(ka)), \quad (4.32)$$

ou na seguinte forma:

$$e^{2iqa} - 2 \left(\cos(ka) + \frac{g}{2} \sin(ka) \right) e^{iqa} + 1 = 0. \quad (4.33)$$

Se escrevermos as exponenciais de (4.33) em termos de seno e cosseno, separando as partes real e imaginária, obtemos duas relações:

$$\cos(2qa) - 2 \cos(ka) \cos(qa) - g \sin(ka) \cos(qa) + 1 = 0, \quad (4.34)$$

$$\sin(2qa) - 2 \cos(ka) \sin(qa) - g \sin(ka) \sin(qa) = 0. \quad (4.35)$$

Usando as seguintes identidades trinogonômétricas:

$$\cos^2(qa) = \frac{1}{2} (1 + \cos 2qa), \quad (4.36)$$

$$\sin(2qa) = 2 \sin(qa) \cos(qa), \quad (4.37)$$

nas relações (4.34) e (4.35), respectivamente, vemos que ambas se reduzem a

$$\cos qa = \cos ka + \frac{\lambda}{2ka} \sin ka, \quad (4.38)$$

que é a relação nos fornecerá as bandas de energia. Vemos que o lado esquerdo de (4.38) está sempre limitado por ± 1 , o que restringe os possíveis valores de energia

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}. \quad (4.39)$$

Temos assim que, onde não há solução de (4.38), são as regiões proibidas de energia ou os "gaps" que separam as bandas de energia. Podemos ver, para a equação (4.38), na Fig.(4.2), as regiões onde as bandas de energia são permitidas, ou seja, regiões limitadas entre ± 1 na qual a curva descrita pelo lado direito de (4.38) não excede este limite. Fora deste limite, caracterizado pelos retangulos, são as regiões de "gap".

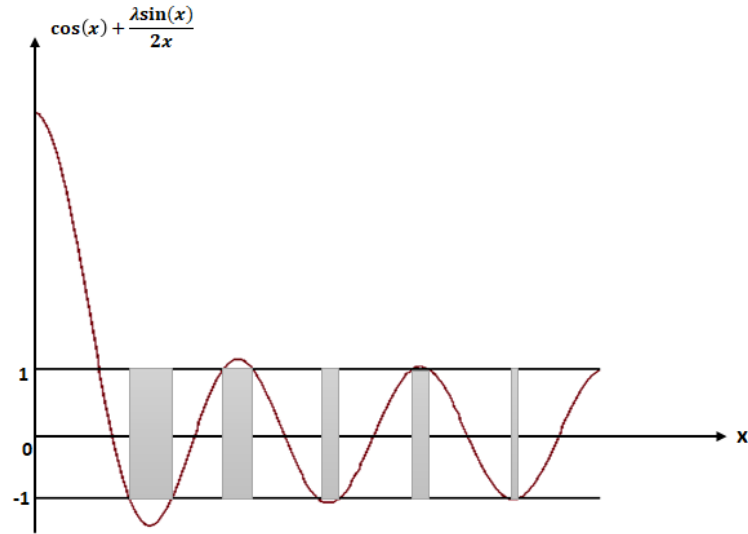


Figura 4.2: Plot de $\cos x + \frac{\lambda}{2x} \sin x$ para o modelo de Kronig-Penney unidimensional com potencial delta. O lado esquerdo de (4.38) tem valores no intervalo $[-1, 1]$. O lado direito é representado pela curva. Nota-se que a equação de Schrodinger é satisfeita nas regiões onde a curva está na região delimitada pelas retas paralelas à abscissa. [Gráfico retirado de Ref. [9]]

4.2 Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) não relativístico com potencial do tipo degrau

Como dito anteriormente, o modelo de elétrons livres não é suficiente para explicar o aparecimento de bandas e "gaps" de energia, pois despreza o efeito dos íons, que compõem a rede cristalina. O modelo de Kronig-Penney leva em consideração um potencial periódico devido aos íons que formam a estrutura cristalina periódica. Nesta seção, discutimos um pouco mais sobre como se dá o surgimento das bandas e gaps de energia e sua relação com a reflexão de Bragg, usando desta vez um potencial tipo degrau periódico. Finalizaremos obtendo a relação para as bandas de energia deste modelo. Antes de abordarmos este modelo e obtermos a relação para as bandas de energia permitidas, devemos ter um melhor entendimento de como surgem as bandas e gaps de energia.

No modelo de elétrons livres, as funções de onda dos elétrons apresentam características de ondas progressivas, sendo definidas usualmente por

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.40)$$

sendo \mathbf{k} o vetor de onda. Para o caso do modelo de elétrons quase livres, quando ocorre a reflexão de Bragg, não teremos mais soluções de ondas progressivas simplesmente. Teremos superposições de ondas progressivas que formam padrões estacionários (ondas estacionárias) das ondas eletrônicas, que levam ao aparecimento dos "gaps" no espectro de energia, também conhecido como

bandas proibidas. Esta reflexão ocorre devido à condição de reflexão de Bragg,

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (4.41)$$

onde d é o espaçamento entre os planos paralelos da rede, θ o ângulo de incidência das ondas em relação aos planos e λ o comprimento das ondas incidentes, sendo n um inteiro. Esta condição pode ser enunciada de outra forma de modo a relacionar o vetor de onda \mathbf{k} e o vetor da rede recíproca \mathbf{G} ,

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2, \quad (4.42)$$

ou da forma

$$G^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = 0, \quad (4.43)$$

dado que \mathbf{G} e $-\mathbf{G}$ funcionam equivalentemente como vetor da rede recíproca. Podemos fazer uma análise da relação $\mathbf{G} \cdot (\mathbf{G} - 2\mathbf{k}) = 0$, considerando que \mathbf{k} e \mathbf{G} são paralelos ou antiparalelos, o que leva à condição

$$k = \pm \frac{1}{2}G = \pm \frac{n\pi}{a}, \quad (4.44)$$

de modo que escrevemos o vetor de rede recíproca na forma

$$|\mathbf{G}| = \frac{2\pi n}{a}, \quad (4.45)$$

com a sendo a constante de rede. Temos que as primeiras reflexões ocorrem para $n = 1$, ou seja,

$$k = \pm \frac{\pi}{a}, \quad (4.46)$$

que demarca também a 1ª banda proibida ou gap. Para $n = 1$ a região entre $-\frac{\pi}{a}$ e $+\frac{\pi}{a}$ constitui a primeira zona de Brillouin, que é uma célula de Wigner-Seitz da rede recíproca. Notamos que os "gaps" separam as diversas zonas de Brillouin. Vale ressaltar que, assim como existe outros gaps de energia, existem outras zonas de Brillouin para valores inteiros de n . O gráfico (4.3) ilustra configuração de energia para o modelo de elétrons livres (a) e quase livres (b), mostrando para este último a disposição das bandas e gaps de energia.

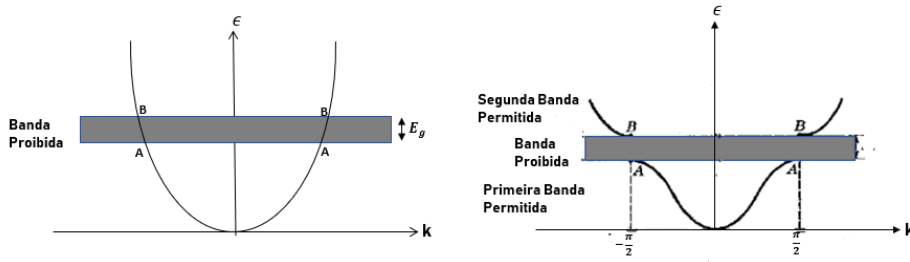


Figura 4.3: O gráfico (a) é referente à relação de dispersão para o elétron livre em função do numero de onda k . O gráfico (b) mostra, para a rede unidimensional cristalina, as energias permitidas e o gap que separa a primeira zona de Brillouin da segunda. Figura retirada da Ref. [11]

Para um entendimento mais detalhado das bandas e "gaps" de energia, precisamos fazer uma análise das ondas estacionárias nos cristais. Podemos definir as ondas estacionárias a partir das ondas progressivas que não satisfazem a condição de Bragg. Pela definição em (4.40), fazemos uma combinação linear das ondas que se propagam para a esquerda e direita, tendo assim

$$\psi_1(x) = e^{i\frac{\pi x}{a}} + e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad (4.47)$$

$$\psi_2(x) = e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2i \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right). \quad (4.48)$$

Verificamos que a densidade de probabilidade associadas às ondas apresentadas na (4.47) e (4.48)

$$|\psi_1(x)|^2 = 4 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad (4.49)$$

$$|\psi_2(x)|^2 = 4 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad (4.50)$$

indica uma distribuição de elétrons variável na rede cristalina periódica com concentração nas proximidades dos pontos em que $|\psi_1(x)| = 1$ ou $|\psi_2(x)| = 1$. Esse cenário difere da densidade de probabilidade da onda progressiva, para a qual vale

$$|\Psi(x)|^2 = e^{ikx} e^{-ikx} = 1,$$

o que é compatível com uma distribuição constante de cargas. Pelo gráfico (4.4), considerando o ponto zero ($x = 0$) da rede cristalina sobre um íon da rede, temos que neste ponto um valor máximo da função (4.49), indicando uma grande probabilidade de que elétrons estejam nessa região, na qual a função (4.50) é mínima ou nula. À medida em que nos afastamos dos íons, a densidade $|\psi_1(x)|^2$ decresce enquanto a densidade $|\psi_2(x)|^2$ aumenta, tornando-se máxima para $x = \frac{a}{2}$. Esse processo se repete por toda a rede cristalina. Se analisamos a energia potencial, vemos que será maior nas proximidades dos íons. Como a função $\psi_1(x)$ é compatível com o acúmulo de elétrons nas regiões próximas aos íons, gerará uma energia potencial média menor (mais negativa, maior em módulo) que àquela associada com $\psi_2(x)$, que acumula elétrons na região entre os íons.

Definindo ε_1 e ε_2 como as energias médias nas regiões em cada região, temos que em módulo $|\varepsilon_1| > |\varepsilon_2|$, de onde podemos definir as seguintes relações

$$|\varepsilon_1| = \varepsilon_l + \Delta\varepsilon, \tag{4.51}$$

$$|\varepsilon_2| = \varepsilon_l - \Delta\varepsilon. \tag{4.52}$$

onde $\Delta\varepsilon$ é o acréscimo ou decréscimo de energia em relação à energia das ondas progressivas ε_l . Se fizermos a diferença de energia entre ε_1 e ε_2 obtemos

$$|\varepsilon_1| - |\varepsilon_2| = 2\Delta\varepsilon = \varepsilon_g, \tag{4.53}$$

onde ε_g é a energia do gap (gerado pela diferença de energia), sendo a causa da descontinuidade de energia no gráfico (4.3b). Portanto, o surgimento dos gaps de energia se dá pela presença de ondas estacionárias que surgem devido às reflexões de Bragg na rede cristalina e acumulam elétrons em regiões de energia potencial maior ou menor. Como visto acima, para o mesmo valor de $k = \frac{\pi}{a}$, obtém-se dois valores para energia correspondente ao limite superior da primeira banda de energia e ao limite inferior da segunda, respectivamente.

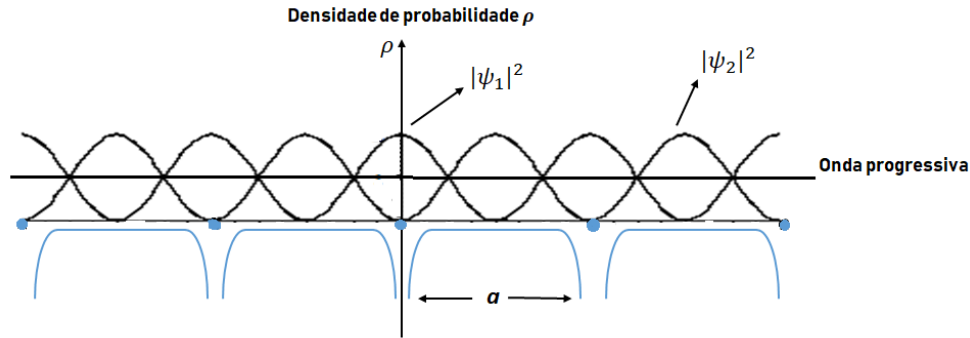


Figura 4.4: Distribuição de densidade para as ondas estacionarias e progressivas na rede cristalina.

4.2.1 Modelo de Kronig-Penney não-relativístico e a relação para as bandas de energia

A construção do modelo de Kronig-Penney não relativístico se dá pelo uso de potenciais periódicos do tipo degrau, no contexto da equação de Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \tag{4.54}$$

cujas soluções podem ser apresentadas na forma da função de Bloch,

$$\Psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \tag{4.55}$$

onde $u(\mathbf{r})$ é a amplitude da função de Bloch, que compartilha da periodicidade da rede, ou seja

$$u(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u(\mathbf{r}), \quad (4.56)$$

sendo \mathbf{T} o vetor de translação que preserva a rede. O teorema de Bloch, cuja forma matemática foi apresentada em (4.14), pode ser enunciado da seguinte forma: "As autofunções da equação de onda para uma partícula submetida a um potencial periódico são dadas como o produto de uma onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ por uma função $u_k(\mathbf{r})$ dotada da periodicidade da rede cristalina" [11]. De (4.55) e (4.56), obtemos

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{T})e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{T})} = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{T}} = \Psi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{T}}, \quad (4.57)$$

notando que as funções de onda $\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{T})$ e $\Psi(\mathbf{r})$ são iguais a menos de uma diferença de fase $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{T}}$. Vale notar que a equação (4.57) é a generalização da equação (4.14) em 3-dimensões.

Voltando à equação de Schrödinger, podemos encontrar as soluções para as regiões com e sem potencial $U(x)$. Observando a Fig. (4.5) para o potencial periódico tipo degrau, temos que na região $0 < x < a$, onde a é a constante de rede, $U(x) = 0$, e a solução é dada por

$$\psi(x)_k = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (4.58)$$

com

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (4.59)$$

Na região $a < x < a + b$, $U(x) = U_0$, a solução é dada por

$$\psi(x)_{k_1} = Ce^{k_1x} + De^{-k_1x}, \quad (4.60)$$

com

$$k_1^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}. \quad (4.61)$$

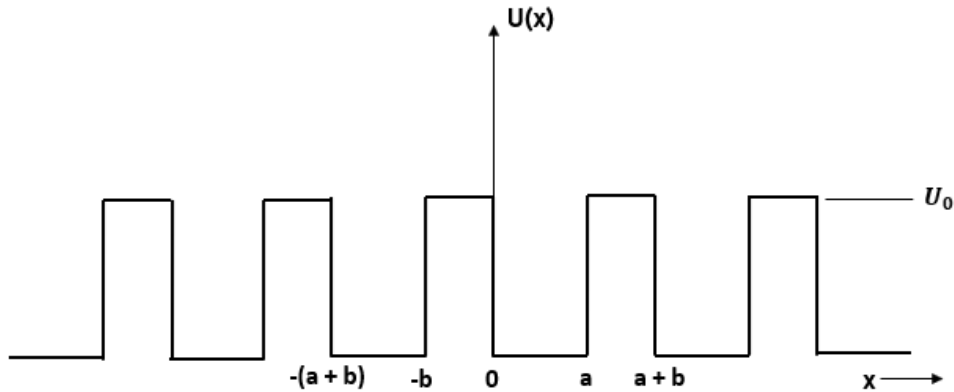


Figura 4.5: Potencial periódico para o modelo de Kronig-Penney. [Retirado da Ref. [11]]

Nas fronteiras em $x = 0$ e $x = a$, temos as seguintes condições de contorno para a continuidade das funções de onda

$$\psi_k(0) = \psi_{k_1}(0), \quad (4.62)$$

$$\frac{d\psi_k(x)}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_{k_1}(x)}{dx}\Big|_{x=0}, \quad (4.63)$$

$$\psi_k(a) = \psi_{k_1}(a), \quad (4.64)$$

$$\frac{d\psi_k(x)}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\psi_{k_1}(x)}{dx}\Big|_{x=a}, \quad (4.65)$$

que fornecem as seguintes equações

$$A + B = C + D, \quad (4.66)$$

$$ik(A - B) = k_1(C - D), \quad (4.67)$$

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = Ce^{k_1a} + De^{-k_1a}, \quad (4.68)$$

$$ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = k_1(Ce^{ik_1a} - De^{-ik_1a}). \quad (4.69)$$

Devemos agora implementar a propriedade da função de Bloch definida em (4.57). Temos que a periodicidade da rede é

$$T = a + b, \quad (4.70)$$

de modo que a solução na região $-b \leq x \leq 0$ deve ser igual à solução na região $a \leq x \leq a + b$, a menos de um fator de fase, ou seja,

$$\Psi_k(a \leq x \leq a + b) = \Psi_{k_1}(-b \leq x \leq 0)e^{iq(a+b)}.$$

Esta equação pode ser considerada para dois pontos específicos, $x = -b$ e $x = a$, pertencentes às duas regiões mencionadas, ou seja:

$$\Psi_k(a) = \Psi_{k_1}(-b)e^{iq(a+b)}. \quad (4.71)$$

Temos assim que as equações (4.68) e (4.69) serão reescritas usando a condição da função de Bloch (4.71),

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = (Ce^{-k_1b} + De^{k_1b})e^{iq(a+b)}, \quad (4.72)$$

$$ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = k_1(Ce^{-k_1b} - De^{k_1b})e^{iq(a+b)}, \quad (4.73)$$

que são as novas equações, junto com (4.66) e (4.67), que usaremos para encontrar a relação para as bandas de energia. Para que haja um solução além da trivial para as equações (4.66), (4.67), (4.72) e (4.73), o determinante da matriz, escrita para os coeficientes de A, B, C e D, seja nulo. Realizando o procedimento para encontrar a solução não trivial, encontramos a

seguinte relação

$$\frac{(k_1^2 - k)}{2k_1k} \sinh(k_1b) \sin(ka) + \cosh(k_1b) \cos(ka) = \cos q(a+b), \quad (4.74)$$

que pode ser escrita como

$$\left(\frac{P}{ka} - \frac{kb}{2}\right) \frac{\sinh(k_1b)}{k_1b} \sin ka + \cosh(k_1b) \cos ka = \cos q(a+b), \quad (4.75)$$

com

$$P = \frac{k_1^2 ba}{2}. \quad (4.76)$$

As equações transcendentais (4.74) e (4.75) são as relações para as bandas de energia permitidas onde q é o vetor de onda da função de Bloch. Podemos simplificar (4.75) considerando o limite em que o potencial das barreiras do tipo degrau é muito elevado ($U(x) \rightarrow \infty$), e a sua largura ($b \rightarrow 0$) muito pequena, transformando o modelo em uma série de potenciais δ , semelhante ao que foi discutido na seção (3.1). Por estas considerações P ainda é finito. Neste limite, vale $k_1 \gg k$ e $k_1b \ll 1$. Temos assim

$$\lim_{k_1b \rightarrow 0} \frac{\sinh(k_1b)}{k_1b} = 1, \quad (4.77)$$

$$\lim_{k_1b \rightarrow 0} \cosh(k_1b) = 1, \quad (4.78)$$

resultando em

$$\frac{P}{ka} \sin ka + \cos ka = \cos qa. \quad (4.79)$$

A relação (4.79) é uma equação transcendental e, portanto, a visualização das suas soluções é realizada através de gráficos. Nota-se que a equação (4.79) tem a mesma estrutura e forma da equação (4.38) obtida na seção (3.1), o que era esperado, uma vez que o limite das equações (4.77) e (4.78) reproduz o caso do potencial (4.15), com a diferença que em (4.79) temos o termo $\frac{P}{ka}$, que assim como $\frac{\lambda}{2ka}$ em (4.38) é adimensional. Uma análise desta equação é feita na Ref. [11] onde se considera $P = \frac{3\pi}{2}$, gerando o perfil do gráfico (4.6). Nota-se as regiões das energias permitidas e os gaps de energia nos limites da zona de Brillouin.

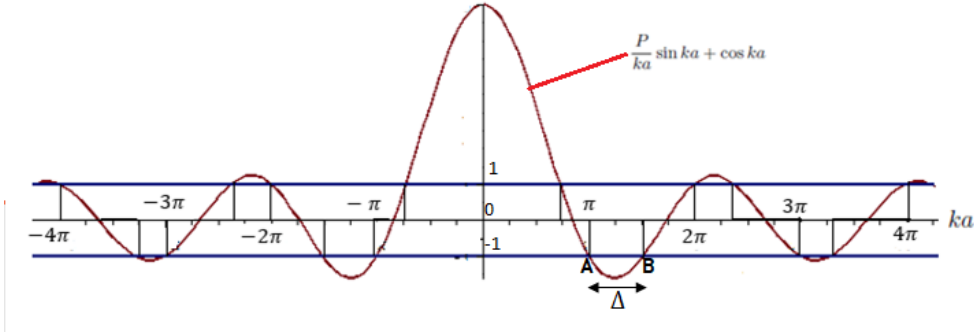


Figura 4.6: Gráfico ilustrativo do lado esquerdo da expressão 4.79, limitada pelos valores ± 1 , que permite entender regiões permitidas (entre os valores -1 e +1) e proibidas (além dos valores -1 ou +1). [Figura retirada da Ref. [11]]

Pelo gráfico (4.6) vemos que o ponto em que $A = k_A a = \pi$ corresponde ao fim da primeira zona de Brillouin e início da região de gap, que termina no ponto B . Considerando que os pontos A e B do gráfico acima diferem por um valor Δ , ou seja, $B > A$ com $B = k_B a = \pi + \Delta$, podemos inferir a energia correspondente ao gap em questão dada por

$$\begin{aligned}
 E_{gap} &= E_B - E_A = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi + \Delta}{a} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \right] \\
 E_{gap} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\Delta^2}{a^2} + \frac{2\pi\Delta}{a^2} \right] \approx \frac{\pi\hbar^2\Delta}{ma^2}.
 \end{aligned} \tag{4.80}$$

Uma análise do gráfico (4.6) juntamente com o gráfico de relação de dispersão, (4.2b), reafirma o que foi dito antes quanto ao início do gap no ponto A de onde percebemos por (4.2b) um curvatura na parábola ou início da descontinuidade na energia ϵ devido a proximidade com o íon da rede em $k = \frac{\pi}{a}$. Temos que E_g na figura (4.2b) corresponde à energia calculada em (4.80).

4.3 Bandas de energia para o modelo de Kronig-Penney(1D) relativístico

Nesta seção, desenvolveremos o modelo de Kronig-Penney relativístico para um sólido unidimensional, com base nas Refs. [24], [14], [6]. Consideremos potenciais $V < 2mc^2$, onde m é massa de repouso da partícula (elétron). A escolha de $V < 2mc^2$ tem a conveniência de evitar as interpretações associadas ao paradoxo de Klein [24]. Para desenvolver o modelo em questão, primeiramente desenvolveremos a equação de Dirac unidimensional e então resolveremos para o caso do potencial do tipo degrau com objetivo de encontrar as matrizes de espalhamento. Por último, usaremos as soluções obtidas em um método que leva em conta uma série de potenciais tipo degrau, de modo a ter um sistema de rede periódica, onde o ferramental do modelo de

Kronig-Penney pode ser aplicado. O desenvolvimento desta seção será baseada na equação de Dirac unidimensional, independente do tempo, que preserva a dinâmica apenas no eixo- x , ou seja

$$(-ich\alpha_x\partial_x + mc^2\beta + V)\Psi = E\Psi, \quad (4.81)$$

onde α_x e β são as matrizes de Dirac, definidas como

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.82)$$

Definindo a função de onda espinorial Ψ de quatro componentes como

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}, \quad (4.83)$$

a equação (4.81) pode ser lida como

$$\begin{pmatrix} mc^2 + V - E & 0 & 0 & -ich\frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & mc^2 + V - E & -ich\frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & -ich\frac{\partial}{\partial x} & -mc^2 + V - E & 0 \\ -ich\frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & -mc^2 + V - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = 0,$$

de onde obtemos as seguintes equações:

$$-ich\frac{\partial}{\partial x}\psi_4 + mc^2\psi_1 - (E - V)\psi_1 = 0, \quad (4.84)$$

$$-ich\frac{\partial}{\partial x}\psi_3 + mc^2\psi_2 - (E - V)\psi_2 = 0, \quad (4.85)$$

$$-ich\frac{\partial}{\partial x}\psi_2 - mc^2\psi_3 - (E - V)\psi_3 = 0, \quad (4.86)$$

$$-ich\frac{\partial}{\partial x}\psi_1 - mc^2\psi_4 - (E - V)\psi_4 = 0, \quad (4.87)$$

que podem ser condensadas em uma única equação, para espinores bidimensionais, escrita na forma

$$-ich\sigma_x\frac{\partial}{\partial x}\phi + mc^2\sigma_z\phi = (E - V)\phi, \quad (4.88)$$

com

$$\phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \text{ ou } \phi = \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}, \quad (4.89)$$

onde σ_x e σ_z são as matrizes de Pauli. A equação (4.88) é uma equação de Dirac bidimensional nos espinores (fomulada numa base matricial (2x2) e dependente apenas de 1 dimensão espacial, portanto unidimensional neste aspecto. Podemos reescrever (4.88) explicitamente na forma de componentes

$$\begin{aligned} -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \phi_1 \\ \frac{\partial}{\partial x} \phi_2 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} &= (E - V) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_2 \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_1 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ -\phi_2 \end{pmatrix} &= (E - V) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.90)$$

onde fazemos a escolha

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (4.91)$$

Podemos então obter duas equações acopladas

$$-i\hbar \frac{\partial \phi_2}{\partial x} = (E' - V) \phi_1, \quad (4.92)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \phi_1}{\partial x} = (E' + 2mc^2 - V) \phi_2, \quad (4.93)$$

onde usamos a redefinição

$$E' = E - mc^2.$$

Para desacoplar (4.92) e (4.93), derivamos (4.92) em relação a x e substituímos em (4.93)

$$-\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2} = (E' - V) (E' + 2mc^2 - V) \phi_2. \quad (4.94)$$

Derivando agora (4.93) e substituindo em (4.92), obtemos

$$-\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} = (E' - V) (E' + 2mc^2 - V) \phi_1. \quad (4.95)$$

As equações (4.94) e (4.95) podem ser escritas compactamente como

$$\frac{\partial^2 \phi_{j(i)}}{\partial x^2} = \frac{(E' - V) (E' + 2mc^2 - V)}{\hbar^2 c^2} = k_i^2 \phi_{j(i)}, \quad (4.96)$$

com

$$k_i^2 = \frac{(E' - V) (E' + 2mc^2 - V)}{\hbar^2 c^2}, \quad (4.97)$$

onde para as regiões 1 ($V(x) = -V_0$) e 2 ($V(x) = 0$), como ilustrado na Fig. (4.7), a relação (4.97) fica definida respectivamente como

$$k_1 = \sqrt{\frac{(E' + V_0) (E' + 2mc^2 + V_0)}{\hbar^2 c^2}}, \quad (4.98)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{E' (E' + 2mc^2)}{\hbar^2 c^2}}, \quad (4.99)$$

com o índice $j = 1, 2$ indicando as duas componentes do espinor e i a região onde as equações são válidas, no caso região com ou sem potencial, sendo $k_1 \neq k_2$ se o potencial na região 1 for diferente do potencial na região 2. As soluções para as equações (4.92) e (4.93) são dadas por

$$\phi_{1(i)} = \alpha_{1(i)}e^{ik_ix} + \beta_{1(i)}e^{-ik_ix}, \quad (4.100)$$

$$\phi_{2(i)} = \alpha_{2(i)}e^{ik_ix} + \beta_{2(i)}e^{-ik_ix}. \quad (4.101)$$

Derivando a Eq. (4.101) em relação à coordenada x ,

$$-i c \hbar \frac{\partial \phi_{2(i)}}{\partial x} = c \hbar k_i \alpha_{2(i)} e^{ik_ix} - c \hbar k_i \beta_{2(i)} e^{-ik_ix}. \quad (4.102)$$

Usando este resultado junto com a Eq. (4.100) na Eq. (4.92), temos

$$c \hbar k_i \alpha_{2(i)} e^{ik_ix} - c \hbar k_i \beta_{2(i)} e^{-ik_ix} = (E' - V) (\alpha_{1(i)} e^{ik_ix} + \beta_{1(i)} e^{-ik_ix}),$$

o que fornece

$$\beta_{2(i)} = -\frac{(E' - V)}{c \hbar k_i} \beta_{1(i)}, \quad (4.103)$$

$$\alpha_{2(i)} = \frac{(E' - V)}{c \hbar k_i} \alpha_{1(i)}. \quad (4.104)$$

Realizando o mesmo procedimento, agora para a Eq. (4.93), encontramos

$$\beta_{1(i)} = -\frac{(E' + 2mc^2 - V)}{c \hbar k_i} \beta_{2(i)}, \quad (4.105)$$

$$\alpha_{1(i)} = \frac{(E' + 2mc^2 - V)}{c \hbar k_i} \alpha_{2(i)}. \quad (4.106)$$

Com os coeficientes $\beta_{2(i)}$ e $\alpha_{2(i)}$, dados na equações (4.103) e (4.104), a equação (4.101) é escrita na forma

$$\phi_{2(i)} = \chi \alpha_{1(i)} e^{ik_ix} - \chi \beta_{1(i)} e^{-ik_ix}. \quad (4.107)$$

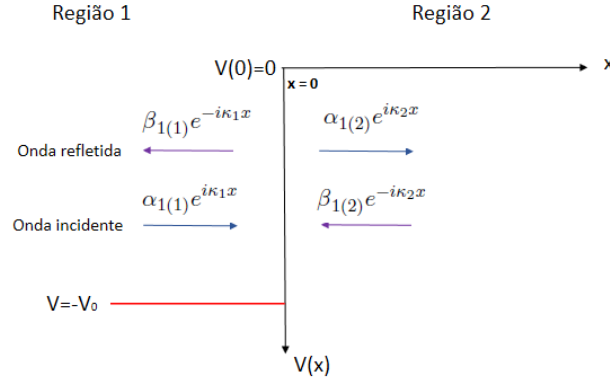


Figura 4.7: Potencial degrau com partículas incidentes e refletidas. Figura baseada na Ref. [24]

As equações (4.100) e (4.101) ficam então

$$\phi_{1(i)} = \alpha_{1(i)}e^{ik_i x} + \beta_{1(i)}e^{-ik_i x}, \quad (4.108)$$

$$\phi_{2(i)} = \chi_i \alpha_{1(i)}e^{ik_i x} - \chi_i \beta_{1(i)}e^{-ik_i x}, \quad (4.109)$$

onde

$$\chi_i = \frac{E' - V}{c\hbar k_i}. \quad (4.110)$$

notando que os coeficientes $\alpha_{2(i)}$ e $\beta_{2(i)}$ foram escritos em termos de (4.103) e (4.104). Podemos especificar a expressão (4.110) para o potencial da Fig. (4.7), como

$$\chi_1 = \frac{E' + V_0}{c\hbar k_1}, \quad \chi_2 = \frac{E'}{c\hbar k_2}. \quad (4.111)$$

Podemos usar as soluções (4.108) e (4.109) para encontrar as matrizes de espalhamento para uma barreira do tipo degrau, exibida na Fig. (4.7). Consideramos elétrons incidindo sobre esta barreira, temos para a região 1, ($i = 1, V(x) = V_0$), e para a região 2, ($i = 2, V(x) = 0$). Temos que impor a condição de continuidade entre as duas regiões,

$$\begin{pmatrix} \phi_{1(1)}(0) \\ \phi_{2(1)}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_{1(2)}(0) \\ \phi_{2(2)}(0) \end{pmatrix}. \quad (4.112)$$

Esta condição é estabelecida especificando a solução (4.108) na região 1 e na região 2, levando à seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} \alpha_{1(1)} \\ \chi_1 \alpha_{1(1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{1(1)} \\ -\chi_1 \beta_{1(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{1(2)} \\ \chi_2 \alpha_{1(2)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{1(2)} \\ -\chi_2 \beta_{1(2)} \end{pmatrix}, \quad (4.113)$$

que se reflete em duas equações:

$$\alpha_{1(1)} + \beta_{1(1)} = \alpha_{1(2)} + \beta_{1(2)}, \quad (4.114)$$

$$\chi_1 \alpha_{1(1)} - \chi_1 \beta_{1(1)} = \chi_2 \alpha_{1(2)} - \chi_2 \beta_{1(2)}. \quad (4.115)$$

Para obter a matriz de espalhamento realizamos o seguinte procedimento: primeiro multiplicamos a equação (4.114) por χ_2 e reescrevemos a equação (4.115), ou seja,

$$\chi_2 (\alpha_{1(1)} + \beta_{1(1)}) = \chi_2 (\alpha_{1(2)} + \beta_{1(2)}), \quad (4.116)$$

$$\chi_1 \alpha_{1(1)} - \chi_1 \beta_{1(1)} = \chi_2 \alpha_{1(2)} - \chi_2 \beta_{1(2)}. \quad (4.117)$$

Somando (4.116) e (4.117)

$$\alpha_{1(1)} (\chi_1 + \chi_2) + \beta_{1(1)} (\chi_2 - \chi_1) = 2\chi_2 \alpha_{1(2)},$$

e dividindo por χ_2 , obtemos

$$\alpha_{1(2)} = \frac{1}{2} \alpha_{1(1)} (1 + \Gamma) + \beta_{1(1)} (1 - \Gamma), \quad (4.118)$$

com

$$\Gamma = \frac{\chi_1}{\chi_2} = \left(\frac{E' + V_0}{E'} \right) \frac{k_2}{k_1}. \quad (4.119)$$

Considerando a Eq. (4.111), (4.98) e (4.99), temos

$$\Gamma = \left(\frac{E' + V_0}{E'} \right) \frac{\sqrt{E' (E' + 2mc^2)}}{\sqrt{(E' + V_0) (E' + 2mc^2 + V_0)}}, \quad (4.120)$$

$$\Gamma = \sqrt{\frac{(E - mc^2 + V_0) (E + mc^2)}{(E - mc^2) (E + mc^2 + V_0)}}. \quad (4.121)$$

Realizando o mesmo procedimento, para obter $\beta_{1(2)}$ em termos dos coeficientes $\alpha_{1(1)}$ e $\beta_{1(1)}$, encontramos:

$$\beta_{1(2)} = \frac{1}{2} \alpha_{1(1)} (1 - \Gamma) + \beta_{1(1)} (1 + \Gamma). \quad (4.122)$$

As relações (4.118) e (4.122) podem ser agrupadas na forma matricial

$$\begin{pmatrix} \alpha_{1(2)} \\ \beta_{1(2)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \Gamma) & (1 - \Gamma) \\ (1 - \Gamma) & (1 + \Gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1(1)} \\ \beta_{1(1)} \end{pmatrix}, \quad (4.123)$$

onde

$$R = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \Gamma) & (1 - \Gamma) \\ (1 - \Gamma) & (1 + \Gamma) \end{pmatrix}, \quad (4.124)$$

é a chamada matriz de espalhamento, que possui como inversa

$$R^{-1} = \frac{1}{2\Gamma} \begin{pmatrix} (1 + \Gamma) & (\Gamma - 1) \\ (\Gamma - 1) & (1 + \Gamma) \end{pmatrix}. \quad (4.125)$$

A matriz de espalhamento R conecta os coeficientes da solução espinorial definida na região 1 aos coeficientes da solução definida na região 2, ou seja, a matriz R permite fazer a passagem da solução espinorial entre regiões adjacentes, submetidas a potenciais distintos.

4.3.1 Relação para as bandas de energia permitidas

O modelo de Kronig-Penney para um sólido unidimensional tem como característica o arranjo em série de potenciais tipo degrau de modo a formar uma série de poços de potencial em cadeia. Para encontrarmos a relação para as bandas de energia, construiremos um operador que irá transladar a função de onda através da rede cristalina. Podemos tomar como ponto de partida, para organização da matriz R , as funções de onda espinoriais (4.108) e (4.109), definidas nas regiões 1 e 2 do potencial da fig. (4.7), aqui reorganizadas na seguinte forma:

$$\phi_1 = J_{(1)}e^{ik_1x/\hbar} + L_{(1)}e^{-ik_1x/\hbar}, \quad (4.126)$$

$$\phi_2 = J_{(2)}e^{ik_2x/\hbar} + L_{(2)}e^{-ik_2x/\hbar}, \quad (4.127)$$

onde $J_{(1)}, J_{(2)}, L_{(1)}, L_{(2)}$ são espinores, definidos por

$$J_{(i)} = \begin{pmatrix} \alpha_{1(i)} \\ \alpha_{2(i)} \end{pmatrix}, \quad L_{(i)} = \begin{pmatrix} \beta_{1(i)} \\ \beta_{2(i)} \end{pmatrix}. \quad (4.128)$$

Em função destes espinores, vale a seguinte relação matricial

$$\begin{pmatrix} J_2 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 \\ L_1 \end{pmatrix}, \quad (4.129)$$

com

$$R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.130)$$

sendo R a matriz de espalhamento obtida anteriormente. De posse destas matrizes, definimos o estado

$$\phi_{(i)} = \begin{pmatrix} J_{(i)}e^{ik_ix/\hbar} \\ L_{(i)}e^{-ik_ix/\hbar} \end{pmatrix}. \quad (4.131)$$

que representa a posição da partícula nas regiões 1 ou 2. O próximo procedimento é definir um operador de transferência que irá transladar a função de onda por uma distância d sem que ultrapasse a descontinuidade entre as regiões. Tal matriz é definida por

$$T_d = \begin{pmatrix} e^{ik_id} & 0 \\ 0 & e^{-ik_id} \end{pmatrix}, \quad (4.132)$$

que aplicada à função de onda espinorial (4.131), fornece

$$T_d \phi_p = \begin{pmatrix} e^{ik_i d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_i d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{(i)} e^{ik_i x} \\ L_{(i)} e^{-ik_i x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{(i)} e^{ik_i(x+d)} \\ L_{(i)} e^{-ik_i(x+d)} \end{pmatrix}. \quad (4.133)$$

A matriz de espalhamento (4.124) é responsável por mover a função de onda para outra região da rede (com potencial distinto). Isso, somado à matriz de translação \mathbf{T} , é possível definir um operador que permite determinar a função de onda em qualquer ponto da rede, dada uma configuração anterior, proposto na forma

$$G_a = T_l R^{-1} T_{a-l} R. \quad (4.134)$$

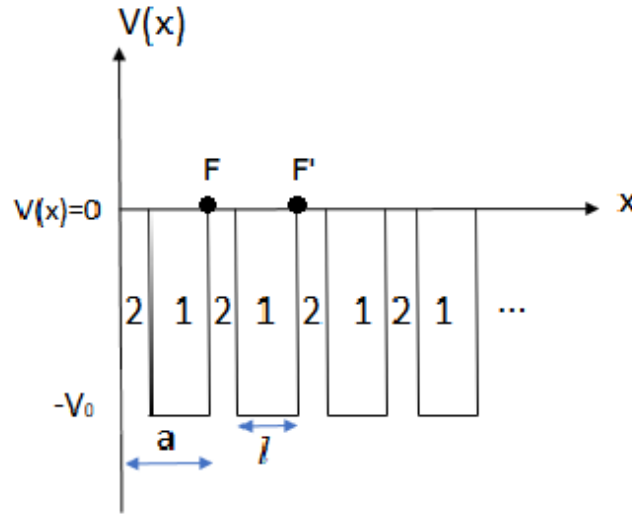


Figura 4.8: Gráfico representativo da série de potenciais para o modelo de Kronig-Penney. As regiões 1 e 2 são regiões com e sem potencial, respectivamente. Temos que o tamanho da célula unitária é "a" e a largura do poço é "l". Figura retirada da Ref. [24]

Pela figura (4.8) podemos descrever como o operador G_a atua sobre a função de onda. Consideremos a função de onda na primeira região 1 do Fig. (4.8), mais especificamente no ponto F . Aplicando o operador G_a nesta função, temos que o primeiro termo, R , leva esta função da região 1 para a 2 (sem potencial). Na borda inicial da região 2 temos que o segundo termo, T_{a-l} , transladará esta função por uma distância $a-l$ até a outra borda desta região, sem que ultrapasse a descontinuidade. O termo R^{-1} levará a função de onda da região 2 para a região 1 e o termo T_b deslocará a função por uma distancia b até o ponto F' , posição equivalente a do início do procedimento mas, em outra célula unitária. Por este processo, temos que este operador atua da seguinte forma:

$$G_a \phi_{(p),I} = \phi_{(p),II}, \quad (4.135)$$

onde os índices I e II indicam a primeira e a segunda célula unitária. Por estarmos trabalhando com uma rede periódica, podemos impor o teorema de Bloch abordados, nas seções anteriores

deste capítulo,

$$e^{i\mu a} \phi_{(p),I} = \phi_{(p),II}. \quad (4.136)$$

Substituindo (4.135) em (4.136),

$$G_a \phi_{(p),I} = e^{i\mu a} \phi_{(p),I}, \quad (4.137)$$

que é lida na forma matricial

$$\begin{pmatrix} G_{a11} & G_{a12} \\ G_{a21} & G_{a22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{(i)} e^{ik_p x} \\ L_{(i)} e^{-ik_p x} \end{pmatrix} = e^{i\mu a} \begin{pmatrix} J_{(i)} e^{ik_p x} \\ L_{(i)} e^{-ik_p x} \end{pmatrix}, \quad (4.138)$$

com

$$G_a = \begin{pmatrix} G_{a11} & G_{a12} \\ G_{a21} & G_{a22} \end{pmatrix}. \quad (4.139)$$

Fazendo $x = 0$ em (4.138), que é a fronteira entre a regiões com e sem potencial, obtemos

$$\begin{pmatrix} G_{a11} J_{(i)} + G_{a12} L_{(i)} \\ G_{a21} J_{(i)} + G_{a22} L_{(i)} \end{pmatrix} = e^{i\mu a} \begin{pmatrix} J_{(i)} \\ L_{(i)} \end{pmatrix}, \quad (4.140)$$

ou simplesmente,

$$\left| \begin{pmatrix} G_{a11} - e^{i\mu a} & G_{a12} \\ G_{a21} & G_{a22} - e^{i\mu a} \end{pmatrix} \right| = 0. \quad (4.141)$$

Uma possível solução, além da trivial, para estas equações é impor que o determinante (Δ) da matriz dos coeficientes de $A_{(p)}$ e $B_{(p)}$ seja igual a zero, o que leva a

$$\begin{aligned} \Delta &= (G_{a11} - e^{i\mu a})(G_{a22} - e^{i\mu a}) - G_{a21}G_{a12} \\ \Delta &= e^{2i\mu a} - (G_{a11} + G_{a22})e^{i\mu a} + G_{a11}G_{a22} - G_{a12}G_{a21} = 0. \end{aligned} \quad (4.142)$$

Multiplicando (4.142) por $e^{-i\mu a}$ e usando a definição de cosseno em termos de números complexos obtemos

$$2 \cos \mu a - e^{-i\mu a} - (G_{a11} + G_{a22}) + (G_{a11}G_{a22} - G_{a12}G_{a21}) e^{-i\mu a} = 0. \quad (4.143)$$

A equação (4.143) fornece

$$\cos \mu a = \frac{1}{2}(G_{a11} + G_{a22}) = \frac{1}{2}\text{Tr}(G_a), \quad (4.144)$$

$$G_{a11}G_{a22} - G_{a12}G_{a21} = \det G_a = 1, \quad (4.145)$$

onde a expressão (4.144) é a relação para as bandas de energia permitidas. Para calculá-la completamente devemos encontrar os valores de G_{a11} e G_{a22} . Para isto, voltamos a expressão (4.134)

e escrevemos a sua forma matricial que é dada por

$$\begin{pmatrix} G_{a11} & G_{a12} \\ G_{a21} & G_{a22} \end{pmatrix} = \frac{1}{4\Gamma} \left[\begin{pmatrix} e^{ik_1 l} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\Gamma) & (\Gamma-1) \\ (\Gamma-1) & (1+\Gamma) \end{pmatrix} \right. \quad (4.146)$$

$$\left. \times \begin{pmatrix} e^{ik_2(a-l)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2(a-l)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\Gamma) & (1-\Gamma) \\ (1-\Gamma) & (1+\Gamma) \end{pmatrix} \right]. \quad (4.147)$$

Calculamos as matrizes começando pelas duas primeiras

$$\begin{pmatrix} e^{ik_1 l} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\Gamma) & (\Gamma-1) \\ (\Gamma-1) & (1+\Gamma) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+\Gamma)e^{ik_1 l} & (\Gamma-1)e^{ik_1 l} \\ (\Gamma-1)e^{-ik_1 l} & (1+\Gamma)e^{-ik_1 l} \end{pmatrix}. \quad (4.148)$$

Multiplicando o resultado em (4.148) pela terceira matriz de (4.146), escrevemos:

$$\begin{pmatrix} G_{a11} & G_{a12} \\ G_{a21} & G_{a22} \end{pmatrix} = \frac{1}{4\Gamma} \begin{pmatrix} (1+\Gamma)e^{ik_1 l}e^{ik_2(a-l)} & (\Gamma-1)e^{ik_1 l}e^{-ik_2(a-l)} \\ (\Gamma-1)e^{-ik_1 l}e^{ik_2(a-l)} & (1+\Gamma)e^{-ik_1 l}e^{-ik_2(a-l)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\Gamma) & (1-\Gamma) \\ (1-\Gamma) & (1+\Gamma) \end{pmatrix}. \quad (4.149)$$

Realizando todas multiplicações matricias, encontramos:

$$G_{a11} = \frac{1}{4\Gamma} e^{ik_1 l} \left[(1+\Gamma)^2 e^{ik_2(a-l)} - (\Gamma-1)^2 e^{-ik_2(a-l)} \right], \quad (4.150)$$

$$G_{a12} = \frac{1}{4\Gamma} (1-\Gamma^2) e^{ik_1 l} \left[e^{ik_2(a-l)} - e^{-ik_2(a-l)} \right], \quad (4.151)$$

$$G_{a21} = \frac{1}{4\Gamma} (1-\Gamma^2) e^{-ik_1 l} \left[e^{-ik_2(a-l)} - e^{ik_2(a-l)} \right], \quad (4.152)$$

$$G_{a22} = \frac{1}{4\Gamma} e^{-ik_1 l} \left[(1+\Gamma)^2 e^{-ik_2(a-l)} - (1-\Gamma)^2 e^{ik_2(a-l)} \right]. \quad (4.153)$$

Podemos simplificar cada termo das componentes acima. Começando por G_{a11} e G_{a22} , escrevemos

$$G_{a11} = \frac{1}{4\Gamma} e^{ik_1 l} \left[(1+\Gamma^2 + 2\Gamma) A - (1+\Gamma^2 - 2\Gamma) A^* \right], \quad (4.154)$$

$$G_{a22} = \frac{1}{4\Gamma} e^{-ik_1 l} \left[(1+\Gamma^2 + 2\Gamma) A^* - (1+\Gamma^2 - 2\Gamma) A \right], \quad (4.155)$$

com

$$A = \cos k_2(a-l) + i \sin k_2(a-l), \quad A^* = \cos k_2(a-l) - i \sin k_2(a-l). \quad (4.156)$$

Simplificando (4.154) e (4.155), resulta

$$G_{a11} = \frac{1}{2\Gamma} e^{ik_1 l} \left[2\Gamma \cos k_2(a-l) + i(1+\Gamma^2) \sin k_2(a-l) \right],$$

$$G_{a22} = \frac{1}{2\Gamma} e^{-ik_1 l} \left[2\Gamma \cos k_2(a-l) - i(1+\Gamma^2) \sin k_2(a-l) \right].$$

Os termo G_{a12} e G_{a21} podem ser escritos como

$$G_{a12} = \frac{i}{2\Gamma} (1-\Gamma^2) e^{ik_1 l} \sin k_2(a-l), \quad (4.157)$$

$$G_{a21} = -\frac{i}{2\Gamma} (1-\Gamma^2) e^{-ik_1 l} \sin k_2(a-l) = G_{a12}^*. \quad (4.158)$$

notamos que $G_{a11} = G_{a22}^*$ e $G_{a12} = G_{a21}^*$. Com a obtenção dos termos, podemos calcular a relação (4.144) para as bandas de energia permitidas

$$\begin{aligned} \cos \mu a &= \frac{1}{4\Gamma} e^{ik_1 l} [2\Gamma \cos k_2(a-l) + i(1+\Gamma^2) \sin k_2(a-l)] \\ &\quad + \frac{1}{4\Gamma} e^{-ik_1 b} [2\Gamma \cos k_2(a-l) - i(1+\Gamma^2) \sin k_2(a-l)], \end{aligned} \quad (4.159)$$

$$\cos \mu a = \frac{1}{4\Gamma} ([4\Gamma \cos k_1 l \cos k_2(a-l) - 2(1+\Gamma^2) \sin k_1 l \sin k_2(a-l)]), \quad (4.160)$$

$$\cos \mu a = \cos k_1 l \cos k_2(a-l) - \frac{\Gamma^{-1} + \Gamma}{2\Gamma} \sin k_1 l \sin k_2(a-l), \quad (4.161)$$

onde o fator Γ (em unidades naturais) é dado por:

$$\Gamma = \sqrt{\frac{(E-m+V_0)(E+m)}{(E-m)(E+m+V_0)}}. \quad (4.162)$$

A equação (4.161) é a relação para as bandas de energia permitidas para a rede unidimensional trabalhada. O lado esquerdo desta equação possui valores entre ± 1 e o lado direito pode assumir valores maiores que o lado esquerdo, representando regiões onde não existem soluções para as funções de onda, sendo, portanto, regiões de bandas de energia proibidas. Vemos que na expressão (4.161) é apresentada a mesma estrutura da relação de banda obtida na Ref. [25]. Em relação a Ref. [7] a Eq. (4.161) apresenta um resultado diferente, creditado ao potencial distinto adotado na mesma, no caso um tipo potencial δ .

Os efeitos relativísticos não são muito perceptíveis quando consideramos a dimensão usual dos parâmetros de rede de materiais cristalinos. Para ilustrar melhor os efeitos relativísticos sobre a estrutura de bandas, é preciso considerar a constante de rede e a largura do potencial na escala do comprimento de onda de Compton, uma escala menor que a típica da física da matéria condensada, mas compatível com a maior energia dos efeitos relativísticos. Pela Fig. (4.9) notamos que a largura das bandas tende a sofrer uma redução devido aos efeitos relativísticos, assim como os gaps. Podemos ver mais detalhadamente estes efeitos (relativísticos) analisando o gráfico da Fig. (4.10), construído para as duas bandas de energia mais baixas, conforme os parâmetros especificados para a largura da banda em função da constante de rede e com potencial fixo.

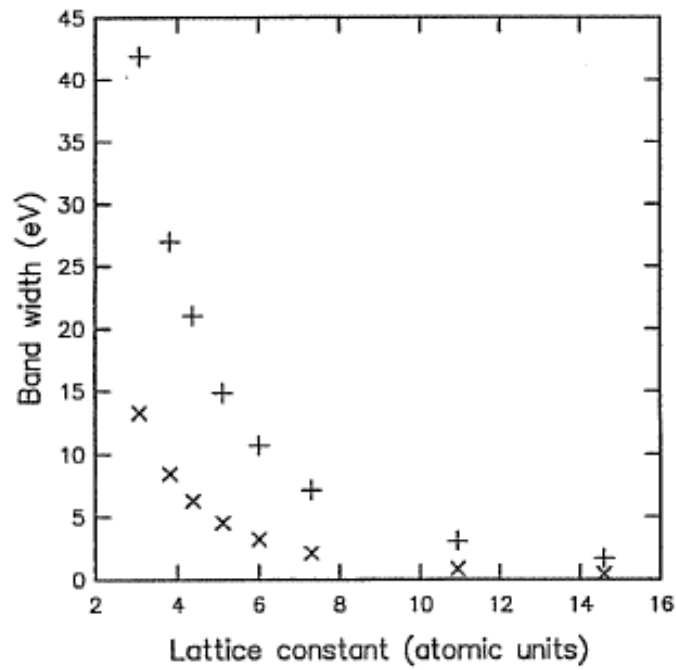


Figura 4.9: Ilustração da largura de bandas de energia, como função da constante de rede, para as duas bandas de energia do modelo de KP relativístico representadas por (\times) e ($+$). Neste gráfico, a constante de rede a é variável, $b = 10^{-5}a$ e o potencial dado por $V_0b = 4.1095 \times 10^{-4}$. Figura retirada do cap. 9 da Ref. [[24]]

Tais efeitos relativísticos podem ser observados em um material real sobre as bandas de mais alta ordem, cujos parâmetros associados são menores que as bandas iniciais.

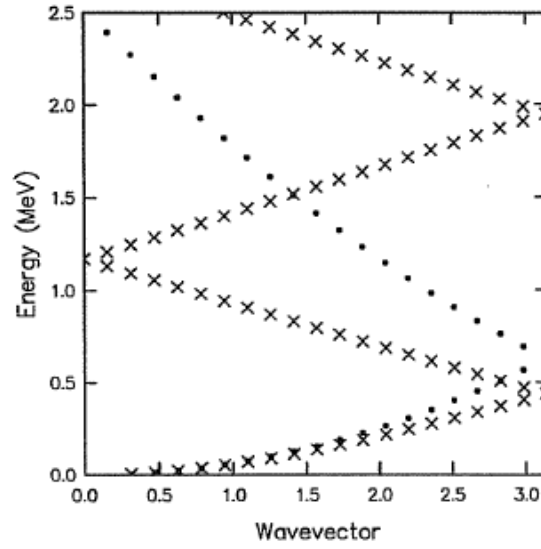


Figura 4.10: Bandas de energia para o modelo de KP relativístico unidimensional com $a = 2\lambda_C$, $b = 1.5 \times 10^{-2}\lambda_C$, com λ_C sendo o comprimento de onda de Compton. A curva em pontos indica a expressão não relativística, enquanto a curva em cruzeiros indica a expressão relativística. Comparando ambos os casos, percebemos uma redução na largura da banda. [Gráfico retirado da Ref. [24]]

4.4 Matriz de espalhamento relativística: uma dedução alternativa

Nesta seção, vamos mostrar que podemos obter a mesma matriz de espalhamento relativística da seção (3.3) por um caminho potencialmente mais simples, que toma como ponto de partida a equação de Dirac

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + m)\Psi = 0, \quad (4.163)$$

e o Hamiltoniano de Dirac para partícula livre que pode ser lido na forma,

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \gamma^0 m, \quad (4.164)$$

que satisfaz a equação independente do tempo, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, onde

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (4.165)$$

é o espinor de Dirac. Na forma matricial a equação de Dirac livre é dada por

$$\left[\begin{pmatrix} m & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (4.166)$$

fornecendo duas equações acopladas para espinores de duas componentes:

$$(E - m)\varphi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\chi, \quad (4.167)$$

$$(E + m)\chi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi. \quad (4.168)$$

Fazendo-se $\varphi = U$ no espinor (4.165) e, usando as Eq. (4.168), a solução para a partícula livre é dada por

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = N \begin{pmatrix} U \\ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})U}{E+m} \end{pmatrix} e^{-(i/\hbar)(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (4.169)$$

sendo N a constante de normalização. Podemos obter a matriz de espalhamento para uma partícula incidente sobre uma barreira negativa de "altura" $-V_0$, usando as soluções de onda plana. Adotaremos uma barreira unidimensional com um partícula deslocando-se na direção- z com $p_z \neq 0$ e $p_x = p_y = 0$ (movimento unidimensional no eixo- z). O potencial é o mesmo da seção (4.3), ilustrado na Fig. (4.7): na região (1), temos $V(z) = -V_0$, na região 2 temos que $V(z) = 0$ e o momento será p_{2z} .

Na região (1), temos $V(z) = -V_0$, e o momento será p_{1z} , dado por:

$$p_{1z} = \sqrt{(E + V_0)^2 - m^2}, \quad (4.170)$$

A solução para esta região é uma combinação linear da onda incidente, $e^{ip_{1z}/\hbar}$, com a onda refletida, $e^{-ip_{1z}/\hbar}$. Desta forma, escrevemos

$$\Psi_1 = A \begin{pmatrix} U \\ \frac{\sigma_z p_{1z}}{E+m+V_0} U \end{pmatrix} e^{ip_{1z}/\hbar} + B \begin{pmatrix} U \\ \frac{-\sigma_z p_{1z}}{E+m+V_0} U \end{pmatrix} e^{-ip_{1z}/\hbar}. \quad (4.171)$$

Na região 2 temos que $V(z) = 0$ e o o momento será p_{2z} , dado por

$$p_{2z} = \sqrt{E^2 - m^2}. \quad (4.172)$$

A solução nesta região também consiste numa superposição de ondas progressivas para a direita ($e^{ip_{2z}/\hbar}$) e para a esquerda ($e^{-ip_{2z}/\hbar}$), ou seja,

$$\Psi_2 = C \begin{pmatrix} U \\ \frac{\sigma_z p_{2z}}{E+m} U \end{pmatrix} e^{ip_{2z}/\hbar} + D \begin{pmatrix} U \\ \frac{-\sigma_z p_{2z}}{E+m} U \end{pmatrix} e^{-ip_{2z}/\hbar}. \quad (4.173)$$

Usando a condição de continuidade

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad (4.174)$$

leva à seguinte equação matricial:

$$A \begin{pmatrix} U \\ \alpha U \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} U \\ \alpha' U \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} U \\ \beta U \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} U \\ \beta' U \end{pmatrix}, \quad (4.175)$$

na qual

$$\alpha = \frac{\sigma_z p_{1z}}{E + m + V_0}, \quad \alpha' = \frac{-\sigma_z p_{1z}}{E + m + V_0}, \quad (4.176)$$

$$\beta = \frac{\sigma_z p_{2z} - b_0}{E + m}, \quad \beta' = \frac{-\sigma_z p_{2z}}{E + m}. \quad (4.177)$$

A Eq. (4.175) leva às seguintes equações

$$(A + B)U = (C + D)U, \quad (4.178)$$

$$(A\alpha + B\alpha')U = (C\beta + D\beta')U, \quad (4.179)$$

ou melhor

$$A + B = C + D, \quad (4.180)$$

$$A\alpha + B\alpha' = C\beta + D\beta'. \quad (4.181)$$

Para desenvolver as Eqs. (4.180) e (4.181), precisamos lançar mão da natureza matricial do operador,

$$\sigma_z p_z = \begin{pmatrix} p_z & 0 \\ 0 & -p_z \end{pmatrix}, \quad (4.182)$$

de modo que a Eq. (4.181) escreve-se como

$$\frac{1}{E + m + V_0} \left[A \begin{pmatrix} p_{1z} & 0 \\ 0 & -p_{1z} \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} -p_{1z} & 0 \\ 0 & p_{1z} \end{pmatrix} \right] \quad (4.183)$$

$$= \frac{1}{E + m} \left(C \begin{pmatrix} p_{2z} & 0 \\ 0 & -p_{2z} \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} -p_{2z} & 0 \\ 0 & p_{2z} \end{pmatrix} \right), \quad (4.184)$$

de onde obtemos a seguinte relação

$$[A - B]p_{1z} = [C - D]p_{2z} \left(\frac{E + m + V_0}{E + m} \right). \quad (4.185)$$

Usando-se a definição,

$$\gamma = \frac{p_{2z}}{p_{1z}} \left(\frac{E + m + V_0}{E + m} \right), \quad (4.186)$$

$$\gamma p_{1z} = p_{2z} \left(\frac{E + m + V_0}{E + m} \right), \quad (4.187)$$

reescrevemos a Eq. (4.185) na forma

$$[A - B]p_{1z} = [C - D]\gamma p_{1z}. \quad (4.188)$$

Precisamos expressar os coeficientes C e D em termos dos coeficientes A e B . Para isso, vamos

inicialmente usar

$$D = A + B - C, \quad (4.189)$$

que ao ser substituído na expressão (4.188), após simplificações fornece:

$$C = \frac{1}{2\gamma} [A(1 + \gamma) + (\gamma - 1)B]. \quad (4.190)$$

Da mesma forma, substituindo $C = A + B - D$ na expressão (4.188), após simplificações encontramos

$$D = \frac{1}{2\gamma} [A(\gamma - 1) + B(\gamma + 1)]. \quad (4.191)$$

Estes resultados podem ser compilados na forma matricial

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = [R] \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (4.192)$$

onde R é matriz de espalhamento, dada por

$$R = \frac{1}{2\gamma} \begin{pmatrix} 1 + \gamma & \gamma - 1 \\ \gamma - 1 & 1 + \gamma \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1/\gamma + 1 & 1 - 1/\gamma \\ 1 - 1/\gamma & 1/\gamma + 1 \end{pmatrix}, \quad (4.193)$$

cuja inversa é

$$R^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \gamma & 1 - \gamma \\ 1 - \gamma & 1 + \gamma \end{pmatrix}, \quad (4.194)$$

onde o fator γ está dado na Eq. (4.186). Vamos agora mostrar que a matriz (4.193) é a mesma obtida na seção anterior. Para isso, precisamos mostrar que o fator $1/\gamma$ contido na matriz (4.193), coincide com o fator Γ da matriz (4.124). Considerando os momentos (4.170) e (4.172), temos

$$\gamma = \frac{\sqrt{(E - m)(E + m)}}{\sqrt{(E + V_0 - m)(E + V_0 + m)}} \left(\frac{E + m + V_0}{E + m} \right), \quad (4.195)$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{(E - m)(E + m + V_0)}}{\sqrt{(E + V_0 - m)(E + m)}}. \quad (4.196)$$

Comparando este resultado com a expressão (4.162), percebemos claramente que vale a relação

$$\frac{1}{\gamma} = \Gamma, \quad (4.197)$$

o que torna a matriz (4.193) equivalente a (4.124). Concluímos assim que esse método de abordagem é equivalente ao da seção anterior.

5 *Modelo de Kronig-Penney relativístico e unidimensional na presença de violação de Lorentz*

5.1 Introdução

Neste capítulo, vamos explorar os efeitos da violação da simetria de Lorentz sobre o modelo de Kronig-Penney relativístico, usando a abordagem apresentada no capítulo anterior. Especificamente, estamos interessados no efeito do seguinte termo CPT-odd (b_μ), axial, pertencente ao setor fermiônico

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}\gamma^\mu b_\mu\gamma_5\psi, \quad (5.1)$$

que implica na equação de Dirac modificada

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m + \gamma^\mu b_\mu\gamma_5)\psi = 0, \quad (5.2)$$

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - b^\mu\gamma_5\gamma^\mu - m)\psi = 0. \quad (5.3)$$

Da lagrangeana (5.1), podemos encontrar a interação Hamiltoniana associada ao termo de VSL,

$$\mathcal{H}_{LV} = \gamma^0\gamma^\mu b_\mu\gamma_5. \quad (5.4)$$

O Hamiltoniano de Dirac para partícula livre, na presença deste termo, pode ser lido na forma,

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \gamma^0 m - b_0\gamma^5 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \quad (5.5)$$

que rege a equação de Dirac independente do tempo, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, na qual

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

é o espinor de Dirac.

5.2 Soluções de partícula livre

Nesta seção, iremos focalizar na obtenção de soluções de partícula livre para a Eq. (5.3), que serão usadas em um sistema típico da física da matéria condensada, o modelo de Kronig-Penney. Para isto, iniciamos com a eq (3.32) escrita no espaço dos momentos,

$$(\gamma^\mu p_\mu - b_\mu \gamma_5 \gamma^\mu - m) \psi = 0, \quad (5.7)$$

$$(\not{p} - \gamma_5 \not{b} - m) \psi = 0, \quad (5.8)$$

que também pode ser escrita na forma,

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\gamma_0 - b_0\gamma_5 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \psi = E\psi. \quad (5.9)$$

Multiplicando a Eq. (5.8) pelo operador $(\not{p} - \gamma_5 \not{b} + m)$, obtemos

$$[p^2 - m^2 - b^2 + \gamma_5 (\not{p}\not{b} - \not{b}\not{p})] \psi = 0, \quad (5.10)$$

onde usamos $\not{p}\not{p} = p^2$. Por fim, multiplicando (5.10) por

$$[p^2 - m^2 - b^2 - \gamma_5 (\not{p}\not{b} - \not{b}\not{p})], \quad (5.11)$$

e usando

$$\not{p}\not{b} + \not{b}\not{p} = 2(p \cdot b), \quad (5.12)$$

encontramos a relação de dispersão desta teoria,

$$(p^2 - m^2 - b^2)^2 + 4p^2 b^2 - 4(p \cdot b)^2 = 0. \quad (5.13)$$

Para obtermos as energias, podemos considerar a expressão acima, separadamente, no caso em que o campo de fundo b^μ é puramente tipo-tempo, $b^\mu = (b_0, 0)$, ou puramente tipo-espaço, $b^\mu = (0, \mathbf{b})$. As energias, respectivamente, para estes dois casos, são dadas por

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 + b_0^2 \pm 2b_0 |\mathbf{p}|}, \quad (5.14)$$

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 + \mathbf{b}^2 \pm 2 \left(m^2 \mathbf{b}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{p})^2 \right)^{1/2}}. \quad (5.15)$$

Para encontrar as soluções espinorais, fazemos uso da seguinte prescrição para o 4-espinor ψ :

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

onde φ_1 e φ_2 são bi-espinores. Inserindo (3.42) na eq. (5.7), encontramos duas equações espinoriais acopladas

$$(E - m - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \varphi_1 + (b_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi_2 = 0, \quad (5.17)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0) \varphi_1 + (-E - m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \varphi_2 = 0. \quad (5.18)$$

Podemos resolver as Eqs. (3.44) e (3.45) de modo a deixar φ_1 em função de φ_2 e φ_2 em função de φ_1 , da seguinte forma:

$$\varphi_1 = \frac{1}{W_2^2} [(E - m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E - m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})] \varphi_2, \quad (5.19)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{W_1^2} [(E + m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E + m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})] \varphi_1, \quad (5.20)$$

com $\mathbf{d} = \mathbf{b} \times \mathbf{p}$, e

$$W_1^2 = (E + m)^2 - \mathbf{b}^2, \quad W_2^2 = (E - m)^2 - \mathbf{b}^2. \quad (5.21)$$

Pela equação de Dirac, observando o 4-espinor ψ , podemos escrever suas soluções espinoriais genericamente na seguinte forma:

$$\psi = N \begin{pmatrix} U \\ B_2 U \end{pmatrix} e^{-(i/\hbar)(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (5.22)$$

com N sendo a constante de normalização, $\varphi_1 = U$, e B_2 sendo o operador matricial dado por:

$$B_2 = \frac{1}{W_1^2} [(E + m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E + m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})]. \quad (5.23)$$

Há aqui uma importante ressalva a mencionar: nem todo espinor U , do tipo 2×1 , pode ser usado na solução (5.22). O ponto é que o espinor U agora é auto-estado de uma expressão matricial que não possui a estrutura de matriz identidade, como ocorre no caso usual (Lorentz-invariante). Observando as Eqs. (5.19), (5.20) e, considerando $\varphi_1 = U$, notamos que vale:

$$U = B_1 B_2 U, \quad (5.24)$$

onde

$$B_1 = \frac{1}{W_2^2} [(E + m) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - (E + m) b_0 - b_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{b} \cdot \mathbf{p} + i (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d})]. \quad (5.25)$$

5.2.1 Configuração de "background" tipo-tempo

Para o caso puramente tipo-tempo, $b^\mu = (b_0, 0)$, a eq. (5.9) reduz-se a

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\gamma_0 - b_0\gamma^5) \psi = E\psi, \quad (5.26)$$

onde o operador $H = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\gamma_0 - b_0\gamma^5)$ é dado explicitamente na forma:

$$H = \begin{bmatrix} m_0 & 0 & p_z - b_0 & p_x - ip_y \\ 0 & m_0 & p_x + ip_y & -p_z - b_0 \\ p_z - b_0 & p_x - ip_y & -m_0 & 0 \\ p_x + ip_y & -p_z - b_0 & 0 & -m_0 \end{bmatrix}. \quad (5.27)$$

As equações anteriores são simplificadas à forma:

$$(E - m)\varphi_1 + (b_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_2 = 0, \quad (5.28)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0)\varphi_1 - (E + m)\varphi_2 = 0, \quad (5.29)$$

ou simplesmente,

$$\varphi_1 = \frac{1}{(E - m)} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0] \varphi_2, \quad (5.30)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{(E + m)} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0] \varphi_1. \quad (5.31)$$

Substituindo a Eq. (5.31) na Eq. (5.30), temos:

$$\varphi_1 = \frac{1}{(E^2 - m^2)} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0] [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0] \varphi_1, \quad (5.32)$$

$$U = \frac{1}{(E^2 - m^2)} [\mathbf{p}^2 + b_0^2 - 2b_0(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})] U, \quad (5.33)$$

ou simplesmente,

$$U = MU, \quad (5.34)$$

com

$$M = \frac{1}{(E^2 - m^2)} [\mathbf{p}^2 + b_0^2 - 2b_0(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})]. \quad (5.35)$$

A Eq. (5.34) mostra que o espinor U procurado precisa ser um auto-estado do operador matricial M . No caso geral, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$, este operador escreve-se na forma:

$$M = \frac{1}{(E^2 - m^2)} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^2 + b_0^2 - 2b_0p_z & -2b_0(p_x - ip_y) \\ -2b_0(p_x + ip_y) & \mathbf{p}^2 + b_0^2 + 2b_0p_z \end{bmatrix}. \quad (5.36)$$

Então, fica claro, que a prática usual de propor $U = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ou $U = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ não pode ser aplicada aqui sem as devidas verificações. Podemos ainda considerar casos particulares, que serão de interesse nesta dissertação. Um caso particular importante é o movimento unidimensional no

eixo-x, $\mathbf{p} = (p_x, 0, 0)$, para o qual a matriz M reduz-se a

$$M = \frac{1}{(E^2 - m^2)} \begin{bmatrix} p_x^2 + b_0^2 & -2b_0p_x \\ -2b_0p_x & p_x^2 + b_0^2 \end{bmatrix}, \quad (5.37)$$

cujos auto-espinores são

$$U = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad U = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.38)$$

Outro caso particular interessante é o movimento unidimensional no eixo-z, $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$, para o qual temos:

$$M = \frac{1}{(E^2 - m^2)} \begin{bmatrix} p_z^2 + b_0^2 - 2b_0p_z & 0 \\ 0 & p_z^2 + b_0^2 + 2b_0p_z \end{bmatrix}, \quad (5.39)$$

cujos auto-espinores são simplesmente

$$U = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad U = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.40)$$

Podemos usar esses resultados preliminares atinentes ao spinor U , do tipo 2×1 , para construir os espinores 4×1 que satisfazem a equação de Dirac modificada, e possuem a forma geral:

$$\psi = N \begin{pmatrix} U \\ B_2U \end{pmatrix} e^{-(i/\hbar)(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (5.41)$$

onde N é a constante de normalização e

$$B_2 = \frac{1}{(E + m)} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - b_0]. \quad (5.42)$$

$$B_2 = \frac{1}{(E + m)} \begin{bmatrix} p_z - b_0 & (p_x - ip_y) \\ (p_x + ip_y) & -p_z - b_0 \end{bmatrix}. \quad (5.43)$$

Para o caso particular $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$, esse espinor tem a estrutura:

$$u_- = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \Omega_-(p_z - b_0) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u_+ = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\Omega_+(p_z + b_0) \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

onde $\Omega_{\pm} = (E_{\pm} \pm m)^{-1}$, e satisfazem relação de autovalores $Hu_{\pm} = E_{\pm}u_{\pm}$, com autovalores:

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 + b_0^2 \pm 2b_0|\mathbf{p}|}. \quad (5.45)$$

Podemos mostrar que essas mesmas soluções podem também ser obtidas por diagonalização direta do hamiltoniano do problema. De fato, considerando a Eq. (5.26), restrita ao caso

particular, $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$, cujo hamiltoniano é,

$$H = \begin{bmatrix} m_0 & 0 & p_z - b_0 & 0 \\ 0 & m_0 & 0 & -p_z - b_0 \\ p_z - b_0 & 0 & -m_0 & 0 \\ 0 & -p_z - b_0 & 0 & -m_0 \end{bmatrix}, \quad (5.46)$$

obtemos os seguintes auto-espinores:

$$u_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z - b_0}{E_- + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_2 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-p_z + b_0}{E_- - m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.47)$$

com autovalores

$$E_- = \pm \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 - 2b_0 p_z}, \quad (5.48)$$

e os autoespinores,

$$u_3 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{p_z + b_0}{E_+ - m} \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u_4 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{p_z + b_0}{E_+ + m} \end{pmatrix}, \quad (5.49)$$

com autovalores

$$E_+ = \pm \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 + 2b_0 p_z}. \quad (5.50)$$

Estas soluções apresentam uma peculiaridade importante: apresentam dependência em E_+ e E_- , que por sua vez dependem de p_z . Neste caso, cabe avaliar o que ocorre quando fazemos a reversão $p_z \rightarrow -p_z$, procedimento usual para retratar a onda plana que se propaga no sentido negativo do eixo-z (em problemas de barreira de potencial). Considerando, $\mathbf{p} = (0, 0, -p_z)$, o hamiltoniano torna-se

$$H = \begin{bmatrix} m_0 & 0 & -p_z - b_0 & 0 \\ 0 & m_0 & 0 & -p_z - b_0 \\ -p_z - b_0 & 0 & -m_0 & 0 \\ 0 & -p_z - b_0 & 0 & -m_0 \end{bmatrix}. \quad (5.51)$$

As soluções correspondentes são os seguintes auto-espinores:

$$u'_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_z + b_0}{E_+ + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u'_2 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z + b_0}{E_+ - m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.52)$$

com autovalores

$$E_+ = \pm \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 + 2b_0 p_z}, \quad (5.53)$$

e os autoespinores,

$$u'_3 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-p_z + b_0}{E_- - m} \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u'_4 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{p_z - b_0}{E_- + m} \end{pmatrix}, \quad (5.54)$$

com autovalores

$$E_- = \pm \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 - 2b_0 p_z}. \quad (5.55)$$

Usaremos as soluções (5.47) e (5.52) nas aplicações ao modelo de Kronig-Penney.

5.2.2 Configuração de "background" tipo-espaço

Para o caso puramente tipo-tempo, $b^\mu = (0, \mathbf{b})$, a eq. (5.9) reduz-se a

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\gamma_0 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \psi = E\psi, \quad (5.56)$$

onde o operador $H = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\gamma_0 + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\Sigma})$ é dado na forma 2×2 ,

$$H = \begin{bmatrix} m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \end{bmatrix}, \quad (5.57)$$

ou explicitamente na forma 4×4 :

$$H = \begin{bmatrix} m + b_z & b_x - ib_y & p_z & p_x - ip_y \\ b_x + ib_y & m - b_z & p_x + ip_y & -p_z \\ p_z & p_x - ip_y & -m + b_z & b_x - ib_y \\ p_x + ip_y & -p_z & b_x + ib_y & -m - b_z \end{bmatrix}. \quad (5.58)$$

Os auto-espinores desta matriz são muito complicados, mas simplificam-se adequadamente quando tratamos o caso unidimensional $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$, com $\mathbf{b} = (0, 0, b_z)$. Neste caso, o hamiltoniano reduz-se a:

$$H = \begin{bmatrix} m + b_z & 0 & p_z & 0 \\ 0 & m - b_z & 0 & -p_z \\ p_z & 0 & -m + b_z & 0 \\ 0 & -p_z & 0 & -m - b_z \end{bmatrix}, \quad (5.59)$$

cujos auto-espinores são:

$$u_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E_0 + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_2 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E_0 - m} \end{pmatrix}, \quad (5.60)$$

com autovalores,

$$E = \pm \left(\sqrt{p_z^2 + m^2} + b_z \right), \quad (5.61)$$

e

$$u_3 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_z}{E_0 - m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_4 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{p_z}{E_0 + m} \end{pmatrix}, \quad (5.62)$$

com autovalores,

$$E = \pm \left(\sqrt{p_z^2 + m^2} - b_z \right), \quad (5.63)$$

com $E_0 = \sqrt{p_z^2 + m^2}$. É ainda importante comentar que as auto-energias obtidas aqui enquadram-se adequadamente no padrão da expressão (5.15). De fato, particularizando a expressão (5.15) para o caso aqui estudado, temos:

$$E = \pm \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_z^2 \pm 2|b_z|(m^2 + p_z^2)^{1/2}}, \quad (5.64)$$

$$E = \pm \sqrt{\left(\sqrt{m^2 + p_z^2} \pm b_z \right)^2}. \quad (5.65)$$

5.3 Modelo de KP em configuração de campo fundo puramente tipo-espaço

Iniciaremos montando a matriz de espalhamento adotando uma configuração de potencial um pouco distinta da que foi adotada no capítulo anterior. Com intuito de maior simplicidade, trabalharemos com uma configuração puramente tipo-espaço particular, ou melhor, $b^\mu = (0, 0, 0, b_z)$. As soluções correspondentes constam nas Eqs. (5.60) e (5.62). Dentre estas, escolhemos:

$$u_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E_0 + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.66)$$

com autovalor,

$$E = \left(\sqrt{p_z^2 + m^2} + b_z \right). \quad (5.67)$$

Podemos obter a matriz de espalhamento para uma partícula incidente sobre uma "barreira" de altura $-V_0$ (Fig. (5.3)) usando as soluções de onda plana na presença do termo de violação de Lo-

rentz b_0 . Nesta abordagem usaremos uma barreira unidimensional com uma partícula deslocando-se na direção- z , ou seja, $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$ - movimento unidimensional no eixo- z . Na região (I), temos $V(z) = 0$, e o momento será p_{1z} , e a solução para esta região é uma combinação linear da onda incidente, $e^{ip_1z/\hbar}$, e refletida, $e^{-ip_1z/\hbar}$, com momento $\mathbf{p} = (0, 0, -p_{1z})$. Desta forma, temos para a região I:

$$E^2 = m^2 + p_z^2 + b_z^2 + 2b_z\sqrt{p_z^2 + m^2}, \quad (5.68)$$

$$\Psi_I = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_{1z}}{E_0+m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_1z/\hbar} + B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_{1z}}{E_0+m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip_1z/\hbar},$$

Na região II temos que $V(z) = -V_0$ e o o momento será p_{2z} . A solução nesta região também uma superposição de ondas progressivas incidente ($e^{ip_2z/\hbar}$) e refletida ($e^{-ip_2z/\hbar}$), ou seja,

$$\Psi_{II} = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_{2z}}{E_0+m+V_0} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_2z/\hbar} + D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p_{2z}}{E_0+m+V_0} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip_2z/\hbar}, \quad (5.69)$$

com

$$(E + V_0)^2 = m^2 + p_z^2 + b_z^2 + 2b_z\sqrt{p_z^2 + m^2}. \quad (5.70)$$

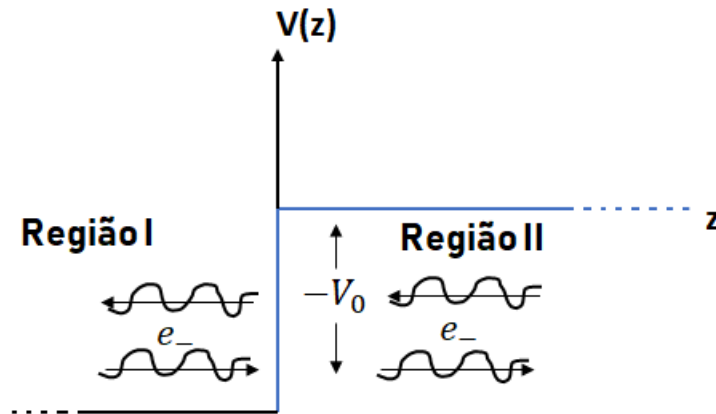


Figura 5.1: Partículas incidentes sobre um potencial do tipo degrau de "altura" $-V_0$. As regiões I e II indicam regiões com ausência e presença de potencial.

Usando a condição de continuidade

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0), \quad (5.71)$$

obtemos a seguinte equação matricial:

$$A + B = C + D, \quad (5.72)$$

na qual

$$A \left(\frac{p_{1z}}{E_0 + m} \right) - B \left(\frac{p_{1z}}{E_0 + m} \right) = C \left(\frac{p_{2z}}{E_0 + m + V_0} \right) - D \left(\frac{p_{2z}}{E_0 + m + V_0} \right), \quad (5.73)$$

Note que agora os momentos p_{1z} e p_{2z} serão obidos das relações de dispersão (5.68) e (5.70) escritas nas regiões 1 e 2, ou seja,

$$p_{1z} = \sqrt{(E - b_z)^2 - m^2}, \quad (5.74)$$

$$p_{2z} = \sqrt{(E + V_0 - b_z)^2 - m^2}. \quad (5.75)$$

A Eq. (5.73) leva à seguinte equação

$$A - B = (C - D) \frac{p_{2z}}{p_{1z}} \left(\frac{E_0 + m}{E_0 + m + V_0} \right), \quad (5.76)$$

$$A - B = (C - D) \Upsilon, \quad (5.77)$$

onde

$$\Upsilon = \frac{p_{2z}}{p_{1z}} \left(\frac{E_0 + m}{E_0 + m + V_0} \right), \quad (5.78)$$

$$\Upsilon = \left(\frac{p_{2z}}{p_{1z}} \right) \left(\frac{\sqrt{p_z^2 + m^2} + m}{\sqrt{p_z^2 + m^2} + m + V_0} \right). \quad (5.79)$$

Precisamos expressar os coeficientes C e D em termos dos coeficientes A e B . Para isso, vamos inicialmente substituir

$$D = A + B - C, \quad (5.80)$$

na expressão (5.77), obtendo:

$$A(1 + \Upsilon) - B(1 - \Upsilon) = 2\Upsilon C.$$

$$C = \frac{1}{2\Upsilon} A(1 + \Upsilon) - \frac{1}{2\Upsilon} B(1 - \Upsilon). \quad (5.81)$$

Substituindo agora $C = A + B - D$ na expressão (5.77), após simplificações, encontramos:

$$A(1 - \Upsilon) - B(1 + \Upsilon) = -2Dp_{2z}\Upsilon, \quad (5.82)$$

$$D = \frac{1}{2\Upsilon}A[\Upsilon - 1] + \frac{1}{2\Upsilon}B[1 + \Upsilon]. \quad (5.83)$$

Estes resultados podem ser expressos na forma matricial

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2\Upsilon} \begin{pmatrix} 1 + \Upsilon & \Upsilon - 1 \\ \Upsilon - 1 & 1 + \Upsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (5.84)$$

com a matriz de espalhamento dada por

$$R = \frac{1}{2\Upsilon} \begin{pmatrix} 1 + \Upsilon & \Upsilon - 1 \\ \Upsilon - 1 & 1 + \Upsilon \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1/\Upsilon + 1 & 1 - 1/\Upsilon \\ 1 - 1/\Upsilon & 1/\Upsilon + 1 \end{pmatrix}, \quad (5.85)$$

cuja inversa é

$$R^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \Upsilon & 1 - \Upsilon \\ 1 - \Upsilon & 1 + \Upsilon \end{pmatrix}, \quad (5.86)$$

com Υ dado na Eq. (5.78). Note que a matriz R obtida tem a mesma genérica da matriz (4.193) da seção (4.4), com $\gamma \rightarrow \Upsilon$. É interessante pontuar que no presente caso a matriz R leva da região sem potencial para a região com potencial, o que é oposto ao cenário explorado no capítulo 4. Isso explica o fato de termos agora

$$\Upsilon = 1/\gamma, \quad (5.87)$$

com γ dado na Eq. (4.196).

5.3.1 Relação para as bandas de energia permitidas

Como estabelecido no Ref. [24], a relação para as bandas de energia permitidas é obtida através da aplicação do teorema de Bloch à função que representa o estado da partícula na rede cristalina. Ao impor o teorema de Bloch, $G\phi_I = \phi_{II}$, obtemos a seguinte relação:

$$\cos \mu a = \frac{1}{2}(G_{11} + G_{22}) = \frac{1}{2}Tr(\hat{G}), \quad (5.88)$$

onde G_{11} e G_{22} são as componentes da diagonal principal da matriz \hat{G} , que executa a translação da função de onda da partícula de um ponto a outro da rede, separados pelo parâmetro de rede. No presente caso, particularizado pelo potencial exibido na Fig. (5.2), a matriz \hat{G} será dada por

$$\hat{G} = T_{a-l}R^{-1}T_lR, \quad (5.89)$$

com R e R^{-1} sendo as matrizes de espalhamento, T_l e T_{a-l} as matrizes de translação entres potenciais constantes, definidas por

$$T_b = \begin{pmatrix} e^{ip_2 l} & 0 \\ 0 & e^{-ip_2 l} \end{pmatrix}, \quad (5.90)$$

$$T_{a-b} = \begin{pmatrix} e^{ip_1(a-l)} & 0 \\ 0 & e^{-ip_1(a-l)} \end{pmatrix}. \quad (5.91)$$

Note que essa é a matriz que cumpre agora o propósito de transladar a função de onda da partícula do ponto inicial, I , ao ponto final, F , exibidos na Fig. (5.2), e separados pelo parâmetro de rede a .

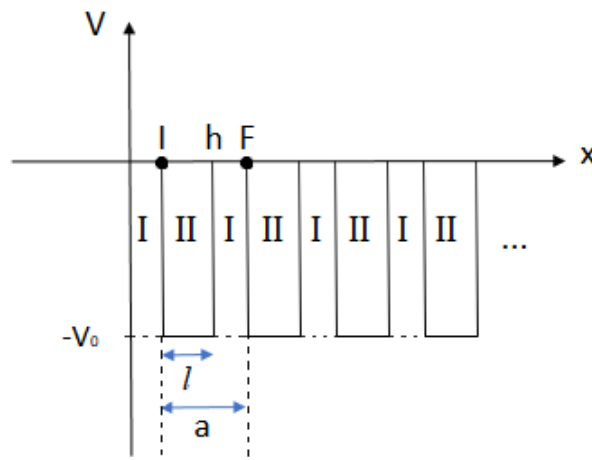


Figura 5.2: Gráfico com para o modelo de KP com uma série de poços de potenciais com a a constante de rede e l a largura do poço. As regiões I e II são regiões com $V(x) = 0$ e $V(x) = -V_0$, respectivamente. Figura retirada da Ref. [24].

Como já visto anteriormente, a matriz \hat{G} tem a função de transladar a função de onda entre as células unitárias vizinhas para uma posição equivalente ao início do deslocamento, tal qual foi explicado no capítulo anterior, e agora adaptado ao potencial da Fig. (5.2). Considere a função de onda inicialmente definida no ponto I . Aplicando o operador G nesta função, termos que o primeiro termo, R , leva esta função da região 1 (sem potencial) para a região 2 (com potencial $-V_0$), mais precisamente para a borda inicial da região 2. Agora entra em cena o segundo termo, T_b , que translada esta função por uma distância l até a outra borda região 2, sem ultrapassar a descontinuidade. O termo R^{-1} levará a função de onda da região 2 para a região 1 (na mesma borda). O termo T_{a-b} desloca a função por uma distancia $(a - l)$ até a outra borda à direita da região 1, chegando ao ponto F , que dista do ponto I inicial pelo parâmetro a , mas em outra célula unitária. Podemos escrever a matriz de espalhamento (5.86) na forma mais geral (apenas

por questão de maior generalidade de cálculo):

$$R = \frac{1}{2\Upsilon} \begin{pmatrix} \tilde{C} + \tilde{A}\Upsilon & -\tilde{D} + \tilde{A}\Upsilon \\ -\tilde{C} + \tilde{B}\Upsilon & \tilde{D} + \tilde{B}\Upsilon \end{pmatrix}, \quad (5.92)$$

cuja inversa é:

$$R^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \tilde{D} + \Upsilon\tilde{B} & \tilde{D} - \Upsilon\tilde{A} \\ \tilde{C} - \Upsilon\tilde{B} & \tilde{C} + \Upsilon\tilde{A} \end{pmatrix}. \quad (5.93)$$

Portanto, a matriz (5.89) é montada da seguinte forma:

$$G = \xi \begin{pmatrix} e^{ip_1(a-l)} & 0 \\ 0 & e^{-ip_1(a-l)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{D} + \Upsilon\tilde{B} & \tilde{D} - \Upsilon\tilde{A} \\ \tilde{C} - \Upsilon\tilde{B} & \tilde{C} + \Upsilon\tilde{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ip_2l} & 0 \\ 0 & e^{-ip_2l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{C} + \Upsilon\tilde{A} & -\tilde{D} + \Upsilon\tilde{A} \\ -\tilde{C} + \Upsilon\tilde{B} & \tilde{D} + \Upsilon\tilde{B} \end{pmatrix}, \quad (5.94)$$

onde

$$\xi = \frac{1}{4\Upsilon}. \quad (5.95)$$

Multiplicando as 4 matrizes em (5.94), obtemos os elementos:

$$G_{11} = \xi e^{ip_1(a-l)} \left[e^{ip_2l} (\tilde{C} + \Upsilon\tilde{A}) (\tilde{D} + \Upsilon\tilde{B}) + e^{-ip_2l} (\Upsilon\tilde{A} - \tilde{D}) (\tilde{C} - \Upsilon\tilde{B}) \right], \quad (5.96)$$

$$G_{12} = \xi e^{ip_1(a-l)} \left[e^{ip_2l} - e^{-ip_2l} \right] (\tilde{D} + \Upsilon\tilde{B}) (\Upsilon\tilde{A} - \tilde{D}), \quad (5.97)$$

$$G_{21} = \xi e^{-ip_1(a-l)} \left[e^{ip_2l} - e^{-ip_2l} \right] (\tilde{C} - \Upsilon\tilde{B}) (\tilde{C} + \Upsilon\tilde{A}), \quad (5.98)$$

$$G_{22} = \xi e^{-ip_1(a-l)} \left[e^{ip_2l} (-\tilde{C} + \Upsilon\tilde{B}) (\tilde{D} - \Upsilon\tilde{A}) + e^{-ip_2l} (\tilde{D} + \Upsilon\tilde{B}) (\tilde{C} + \Upsilon\tilde{A}) \right]. \quad (5.99)$$

onde

$$G = \frac{1}{4\Upsilon} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}. \quad (5.100)$$

Simplificando os elementos acima, temos

$$G_{11} = \xi e^{ip_1(a-l)} \left[\Upsilon (\tilde{A} + \tilde{B}) (\tilde{C} + \tilde{D}) \cos(p_2l) + i \sin(p_2l) (\Upsilon (\tilde{B} - \tilde{A}) (\tilde{C} - \tilde{D}) + 2\tilde{C}\tilde{D} + 2\Upsilon^2\tilde{A}\tilde{B}) \right], \quad (5.101)$$

$$G_{22} = \xi e^{-ip_1(a-l)} \left[\Upsilon (\tilde{A} + \tilde{B}) (\tilde{C} + \tilde{D}) \cos(p_2l) - i \sin(p_2l) [\Upsilon (\tilde{B} - \tilde{A}) (\tilde{C} - \tilde{D}) + 2\tilde{C}\tilde{D} + 2\Upsilon^2\tilde{A}\tilde{B}] \right], \quad (5.102)$$

$$G_{12} = 2\xi e^{ip_1(a-l)} [i \sin(p_2l)] (\tilde{D} + \Upsilon\tilde{B}) (\Upsilon\tilde{A} - \tilde{D}), \quad (5.103)$$

$$G_{21} = 2\xi e^{-ip_1(a-l)} [i \sin(p_2l)] (\tilde{C} - \Upsilon\tilde{B}) (\tilde{C} + \Upsilon\tilde{A}), \quad (5.104)$$

De acordo com tais resultado, observamos que $G_{11} = G_{22}^*$, de modo que

$$\begin{aligned} Tr(\hat{G}) = & 2\xi \left[\Upsilon (\tilde{A} + \tilde{B}) (\tilde{C} + \tilde{D}) \cos(p_2 l) \cos(p_1(\tilde{A} - l)) + (2\tilde{C}\tilde{D} + \Upsilon (\tilde{B} - \tilde{A})) (\tilde{C} - \tilde{D}) \right. \\ & \left. + 2\Upsilon^2 \tilde{A}\tilde{B} \sin(p_1(a - l)) \sin(p_2 l) \right]. \end{aligned} \quad (5.105)$$

A relação das bandas de energia permitidas é dada pela Eq. (5.88). Como no presente caso, temos $\tilde{A} = \tilde{B} = \tilde{C} = \tilde{D} = 1$, resulta em

$$Tr(\hat{G}) = 2\xi \left[4\Upsilon \cos(p_2 l) \cos(p_1(\tilde{A} - l)) + 2(1 + \Upsilon^2) \sin(p_1(a - l)) \sin(p_2 l) \right].$$

de modo que encontramos a seguinte expressão para as bandas de energia permitidas:

$$\cos \mu a = \xi \left[4\Upsilon \cos(p_2 l) \cos(p_1(\tilde{A} - l)) + 2(1 + \Upsilon^2) \sin(p_1(a - l)) \sin(p_2 l) \right].$$

A simplificação desta expressão fornece

$$\cos \mu a = \cos(lp_2) \cos(p_1(a - l)) + \frac{(1 + \Upsilon^2)}{2\Upsilon} [\sin(p_1(a - l)) \sin(p_2 l)], \quad (5.106)$$

que faz o papel da expressão (4.161) na presença do campo de fundo $b^\mu = (0, 0, 0, b_z)$, com $\Upsilon \rightarrow \Gamma$. Lembrando que agora vale:

$$\Upsilon = \frac{p_{2z}}{p_{1z}} \left(\frac{E_0 + m}{E_0 + m + V_0} \right). \quad (5.107)$$

Na ausência de violação de simetria de Lorentz ($b_z = 0$), as Eqs. (5.74) e (5.75) são reduzidas a

$$p_{1z} = \sqrt{E^2 - m^2}, \quad (5.108)$$

$$p_{2z} = \sqrt{(E + V_0)^2 - m^2}, \quad (5.109)$$

levando o fator (5.78) à forma:

$$\Upsilon_0 = \sqrt{\frac{(E + m)(E + V_0 - m)}{(E + m + V_0)(E - m)}}. \quad (5.110)$$

O resultado (5.106) assim se reduz a

$$\cos \mu a = \cos(lp_2) \cos(p_1(a - l)) + \frac{(1 + \Upsilon_0^2)}{2\Upsilon_0} \sin(lp_2) \sin(p_1(a - l)). \quad (5.111)$$

Esta expressão pode ser comparada à Eq. (4.161),

$$\cos \mu a = \cos k_1 l \cos k_2(a - l) - \frac{1 + \Gamma^2}{2\Gamma} \sin k_1 l \sin k_2(a - l), \quad (5.112)$$

onde

$$\Gamma = \sqrt{\frac{(E - m + V_0)(E + m)}{(E - m)(E + m + V_0)}}. \quad (5.113)$$

Percebemos que o resultado (5.106) torna-se análogo ao resultado (4.161) quando lembramos que $k_1 = p_2$ e $k_2 = p_1$, pelo fato de estarmos trabalhando agora com um potencial distinto do capítulo anterior.

Resta ainda comentar que a relação de bandas obtida, Eq. (5.106), depende do fator de violação de Lorentz (b_z), que está dentro dos momentos. Vide Eqs. (5.74) e (5.75). Cabe ainda investigar como a dependência implícita no fator b_z altera as relações da banda de energia.

5.4 Modelo de KP em configuração de campo fundo puramente tipo-tempo

Assim como fizemos no caso tipo-espaço, vamos proceder no caso tipo-tempo, $b^\mu = (b_0, 0)$, adotando também uma configuração particular mais simples para o momento, $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$. As soluções correspondentes constam nas Eqs. (5.47) e (5.52). Dentre estas, escolhemos para as ondas progressivas:

$$u_1(p_z) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z - b_0}{E_- + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u'_1(-p_z) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-p_z - b_0}{E_+ + m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.114)$$

com autovalor

$$E_- = \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 - 2b_0p_z}, \quad (5.115)$$

$$E_+ = \sqrt{p_z^2 + m^2 + b_0^2 + 2b_0p_z}. \quad (5.116)$$

Sabemos que neste caso, a energia da partícula livre ou na presença de um potencial constante V_0 é dada, nas regiões I e II, respectivamente, por

$$E^2 = m^2 + p_z^2 + b_0^2 - 2b_0p_z, \quad (5.117)$$

$$(E + V_0)^2 = m^2 + p_z^2 + b_0^2 - 2b_0p_z. \quad (5.118)$$

Podemos obter a matriz de espalhamento para uma partícula incidente sobre uma "barreira" de altura $-V_0$ (Fig. (5.3)) usando as soluções de onda plana na presença do termo de violação de Lorentz b_0 . Nesta abordagem usaremos uma barreira unidimensional com uma partícula deslocando-se na direção z , ou seja, $\mathbf{p} = (0, 0, p_z)$ - movimento unidimensional no eixo- z . Na região (I), temos $V(z) = 0$, e o momento será p_{1z} , e a solução para esta região é uma combinação linear da onda incidente - $e^{ip_1z/\hbar}$ - e refletida - $e^{-ip_1z/\hbar}$, com momento $\mathbf{p} = (0, 0, -p_{1z})$. Desta forma, escrevemos:

$$\Psi_I = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_{1z}-b_0}{E_-+m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_1z/\hbar} + B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-p_{1z}-b_0}{E_++m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip_1z/\hbar}, \quad (5.119)$$

Na região II temos que $V(z) = -V_0$ e o momento será p_{2z} . A solução nesta região também uma superposição de ondas progressivas incidente ($e^{ip_2z/\hbar}$) e refletida ($e^{-ip_2z/\hbar}$), ou seja,

$$\Psi_{II} = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_{2z}-b_0}{E_-+m+V_0} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_2z/\hbar} + D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-p_{2z}-b_0}{E_++m+V_0} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip_2z/\hbar}. \quad (5.120)$$

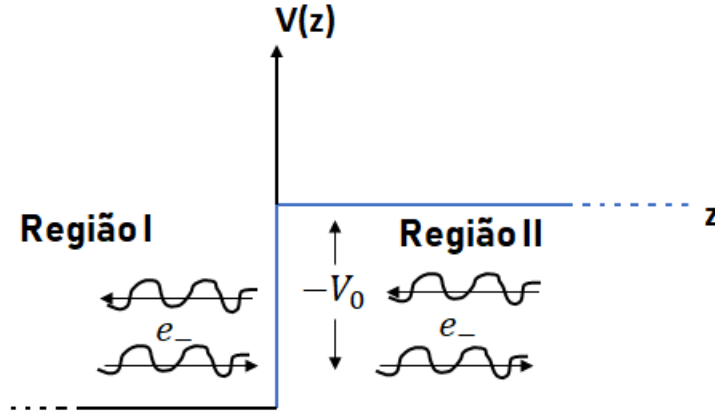


Figura 5.3: Partículas incidentes sobre um potencial do tipo degrau de "altura" $-V_0$. As regiões I e II indicam regiões sem e com potencial.

Usando a condição de continuidade

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0), \quad (5.121)$$

leva à seguinte equação matricial:

$$A + B = C + D, \quad (5.122)$$

na qual

$$A \begin{pmatrix} \frac{p_{1z}-b_0}{E_-+m} \end{pmatrix} - B \begin{pmatrix} \frac{p_{1z}+b_0}{E_++m} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} \frac{p_{2z}-b_0}{E_-+m+V_0} \end{pmatrix} - D \begin{pmatrix} \frac{p_{2z}+b_0}{E_++m+V_0} \end{pmatrix}, \quad (5.123)$$

Note que agora os momentos p_{1z} e p_{2z} serão obidos das relações de dispersão (5.117) e (5.118) escritas nas regiões 1 e 2, ou seja,

$$E_{\pm}^2 = m^2 + p_{1z}^2 + b_0^2 \pm 2b_0 p_{1z}, \quad (5.124)$$

$$(E_{\pm} + V_0)^2 = m^2 + p_{2z}^2 + b_0^2 \pm 2b_0 p_{2z}. \quad (5.125)$$

Resolvendo o sistema, encontramos:

$$p_{1z} = \sqrt{E^2 - m^2 + b_0}, \quad (5.126)$$

$$p_{2z} = \sqrt{(E + V_0)^2 - m^2 + b_0}. \quad (5.127)$$

A Eq. (5.123) leva às seguintes equações

$$A \left(\frac{p_{1z} - b_0}{E_- + m} \right) - B \left(\frac{p_{1z} + b_0}{E_+ + m} \right) = C \left(\frac{p_{2z} - b_0}{E_- + m + V_0} \right) - D \left(\frac{p_{2z} + b_0}{E_+ + m + V_0} \right), \quad (5.128)$$

$$A\eta_- (p_{1z} - b_0) - B\eta_+ (p_{1z} + b_0) = C\lambda_- (p_{2z} - b_0) - D\lambda_+ (p_{2z} + b_0), \quad (5.129)$$

onde

$$\eta_{\pm} = \frac{1}{E_{\pm} + m}, \quad \lambda_{\pm} = \frac{1}{E_{\pm} + m + V_0}. \quad (5.130)$$

Das equações acima podemos obter duas relações

$$\left[A(p_{1z} - b_0) - B \frac{\eta_+}{\eta_-} (p_{1z} + b_0) \right] \eta_- = \left[C(p_{2z} - b_0) - D \frac{\chi_+}{\chi_-} (p_{2z} + b_0) \right] \chi_-, \quad (5.131)$$

$$\left[A(p_{1z} - b_0) - B \left(\frac{\eta_+}{\eta_-} \right) (p_{1z} + b_0) \right] = \left[C(p_{2z} - b_0) - D \left(\frac{\chi_+}{\chi_-} \right) (p_{2z} + b_0) \right] \frac{\chi_-}{\eta_-}, \quad (5.132)$$

$$[A(p_{1z} - b_0) - B\eta(p_{1z} + b_0)] = [C(p_{2z} - b_0) - D\chi(p_{2z} + b_0)] \frac{\chi_-}{\eta_-}, \quad (5.133)$$

onde

$$\eta = \left(\frac{\eta_+}{\eta_-} \right), \quad \chi = \left(\frac{\chi_+}{\chi_-} \right). \quad (5.134)$$

Deixamos para avaliar o efeito do sinal de b_0 na expressão final da estrutura de bandas. Fazemos agora a definição,

$$\gamma = \frac{p_{2z}}{p_{1z}} \left(\frac{\chi_-}{\eta_-} \right), \quad (5.135)$$

$$\gamma \frac{p_{1z}}{p_{2z}} = \left(\frac{\chi_-}{\eta_-} \right), \quad (5.136)$$

ou melhor,

$$\gamma = \frac{\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2 + b_0}}{\sqrt{E^2 - m^2 + b_0}} \left(\frac{\chi_-}{\eta_-} \right). \quad (5.137)$$

Obviamente, no limite em que $b_0 \rightarrow 0$, recuperamos o fator original

$$\gamma_0 = \sqrt{\frac{(E+m)(E-m+V_0)}{(E-m)(E+m+V_0)}}. \quad (5.138)$$

Substituindo (5.136) na Eq. (5.133), temos

$$A(p_{1z} - b_0) - B\eta(p_{1z} + b_0) = [C(p_{2z} - b_0) - D\chi(p_{2z} + b_0)] \left(\frac{\gamma p_{1z}}{p_{2z}} \right). \quad (5.139)$$

Precisamos expressar os coeficientes C e D em termos dos coeficientes A e B . Para isso, vamos inicialmente usar $D = A + B - C$, que ao ser substituído na expressão (5.139), após simplificações, fornece:

$$A(p_{1z} - b_0) - B\eta(p_{1z} + b_0) = [C(p_{2z} - b_0) + C\chi(p_{2z} + b_0) - (A + B)\chi(p_{2z} + b_0)] \left(\frac{\gamma p_{1z}}{p_{2z}} \right), \quad (5.140)$$

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{T} [(p_{1z}p_{2z} - b_0p_{2z} + \chi\gamma p_{1z}(p_{2z} + b_0))A - B(\eta(p_{1z} + b_0)p_{2z} - \chi\gamma p_{1z}(p_{2z} + b_0))], \\ &= \frac{1}{T} [(p_{1z}p_{2z}(1 + \chi\gamma) - b_0(p_{2z} - \chi\gamma p_{1z}))A + B((\chi\gamma - \eta)p_{1z}p_{2z} + b_0(\chi\gamma p_{1z} - \eta p_{2z}))], \end{aligned} \quad (5.141)$$

onde

$$T = \gamma p_{1z} [p_{2z}(\chi + 1) + b_0(\chi - 1)].$$

Vamos agora usar $C = A + B - D$,

$$A(p_{1z} - b_0) - B\eta(p_{1z} + b_0) = [-D(p_{2z} - b_0) + (A + B)(p_{2z} - b_0) - D\chi(p_{2z} + b_0)] \left(\frac{\gamma p_{1z}}{p_{2z}} \right),$$

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{T} [(-p_{1z}p_{2z} + b_0p_{2z} + \gamma p_{1z}p_{2z} - b_0\gamma p_{1z})A + B(\eta p_{1z}p_{2z} + \eta b_0p_{2z} + \gamma p_{1z}p_{2z} - b_0\gamma p_{1z})], \\ &= \frac{1}{T} [(p_{1z}p_{2z}(\gamma - 1) + b_0(p_{2z} - \gamma p_{1z}))A + B((\eta + \gamma)p_{1z}p_{2z} + b_0(\eta p_{2z} - \gamma p_{1z}))]. \end{aligned}$$

Estes resultados podem ser expressos na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} p_{1z}p_{2z}(1 + \chi\gamma) - b_0(p_{2z} - \chi\gamma p_{1z}) & (\chi\gamma - \eta)p_{1z}p_{2z} + b_0(\chi\gamma p_{1z} - \eta p_{2z}) \\ p_{1z}p_{2z}(\gamma - 1) + b_0(p_{2z} - \gamma p_{1z}) & (\eta + \gamma)p_{1z}p_{2z} + b_0(\eta p_{2z} - \gamma p_{1z}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (5.143)$$

com a matriz de espalhamento dada por

$$R = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} p_{1z}p_{2z}(1 + \chi\gamma) - b_0(p_{2z} - \chi\gamma p_{1z}) & (\chi\gamma - \eta)p_{1z}p_{2z} + b_0(\chi\gamma p_{1z} - \eta p_{2z}) \\ (p_{1z}p_{2z}(\gamma - 1) + b_0(p_{2z} - \gamma p_{1z})) & (\eta + \gamma)p_{1z}p_{2z} + b_0(\eta p_{2z} - \gamma p_{1z}) \end{pmatrix}. \quad (5.144)$$

Como essa matriz é deveras complicada, vamos deixar a finalização da análise do caso tipo-tempo para um momento futuro.

6 Conclusões

No capítulo 3, fizemos uma introdução sobre o MPE e alguns dos seus setores principais, como o fotônico e o setor fermiônico, que contém o termo de violação de Lorentz axial, em termos do vetor b^μ . Vimos que este termo altera as soluções espinoriais e a relação dispersão relativística. No capítulo 4, revisamos o modelo de KP não-relativístico e relativístico. No caso não relativístico, verificamos que a relação para as bandas, no caso de uma série de poços de potenciais, quando fazemos o limite em que a largura do poço vai a zero e seu potencial muito grande, é equivalente à obtida para o caso de potencial δ . As relações de banda mostram que para certas regiões, chamadas de gaps, a equação de banda de energia não se satisfaz, ou seja, nessas regiões não haverá elétrons ocupando determinando estados, sendo uma região proibida. Estes elétrons estarão apenas em regiões com bandas de energia permitidas. O caso relativístico apresenta a mesma característica com a formação de bandas e gaps. No entanto, constatamos pelos gráficos que as bandas de energia e os gaps sofrem uma redução devidos aos efeitos relativísticos, o que acarreta na aproximação das bandas de energia e encurtamentos dos gaps, tornando o material potencialmente mais condutível (quando tais correções são apropriadas). No capítulo 5, discutimos o modelo de Kronig-Penney quântico-relativístico na presença de termos de violação de Lorentz, $\mathcal{L} = \bar{\Psi}\gamma^\mu b_\mu \gamma_5 \Psi$. Obtivemos as soluções espinoriais de partícula livre, para a equação de Dirac modificada por este termo, em algumas situações particulares (para campo de fundo tipo-tempo e tipo-espaço). Em seguida, usamos as soluções do caso tipo espaço para desenvolver o modelo de Kronig-Penney e encontrar as relações de banda de energia. O caso tipo-tempo mostrou-se bem mais complicado, mesmo nas situações mais simples possíveis.

Uma opção talvez interessante, e potencialmente geradora de resultados mais impactantes sobre a estrutura de banda, seja tomar o limite não-relativístico dos resultados obtidos neste capítulo, ou seguir uma rota distinta: tomar o limite não-relativístico da Lagrangeana de Dirac suplementada pelo termo $\mathcal{L} = \bar{\Psi}\gamma^\mu b_\mu \gamma_5 \Psi$. Tomando os termos gerados no regime não-relativísticos, podemos inseri-los no potencial tipo poço do modelo de KP não-relativístico. Esta tarefa possivelmente não será tão simples, uma vez que envolve termos de potenciais dependentes das matrizes de Pauli.

APÊNDICE A – Equação de Dirac

Sabe-se que na mecânica quântica não-relativística a equação de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi + V\psi, \quad (\text{A.1})$$

descreve e fornece informações a respeito do comportamento e propagação de partículas, bastando conhecer a sua função de onda Ψ . Em um contexto relativístico, temos a equação de Klein-Gordon, que descreve partículas de spin 0, a equação de Proca, que descreve partículas de spin 1, e a equação de Dirac que descreve as partículas de spin $\frac{1}{2}$, como quarks, leptons (partículas de matéria) e férmions em geral.

A equação de Dirac pode ser obtida a partir da forma da equação de "Schrödinger relativística",

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad (\text{A.2})$$

onde H representa a energia relativística, $H = \sqrt{(m_0c^2)^2 + \mathbf{p}^2c^2}$. Sendo relativística, deve ser covariante sob as transformadas de Lorentz. Esta equação é dada em termos de uma derivada primeira no tempo (no intuito de proporcionar densidade de probabilidade positivo-definida) e também derivadas primeiras no espaço, por ser covariante, de modo que escrevemos:

$$H = \beta m_0c^2 + c\alpha^i p^i, \quad (\text{A.3})$$

onde β e α^i são matrizes 4×4 dadas por:

$$\alpha^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} 1_{2x2} & 0 \\ 0 & -1_{2x2} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

onde σ^i são as matrizes de Pauli, $\sigma^i = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, definidas por

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

e satisfazem

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\alpha_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}. \quad (\text{A.6})$$

As matrizes α^i e β possuem traço nulo, $Tr(\beta) = Tr(\alpha^i) = 0$, e satisfazem as seguintes relações:

$$\beta^2 = 1, (\alpha^i)^2 = 1, \quad (\text{A.7})$$

$$\beta\alpha^i + \alpha^i\beta = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\alpha^i\alpha^j + \alpha^j\alpha^i = 2\delta_{ij}, \quad (\text{A.9})$$

onde vale a representação matricial,

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Com esse resultado, o Hamiltoniano da equação de Dirac, $H = \beta m_0 c^2 + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$, é dado pela seguinte matriz:

$$H = \begin{bmatrix} m_0 c^2 & 0 \\ 0 & -m_0 c^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_0 c^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m_0 c^2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Por inspecção, é fácil perceber que a dependencia temporal das soluções deve ser dada por

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (\text{A.12})$$

o que compatível com $H\psi = E\psi$. Escrevendo o espinor

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

montamos a equação matricial

$$\begin{bmatrix} m_0 c^2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m_0 c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

que fornece as seguintes equações para os espinores de Pauli, φ, χ :

$$(E - m_0 c^2)\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi, \quad (\text{A.15})$$

$$(E - m_0 c^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi, \quad (\text{A.16})$$

sendo φ, χ espinores 2×1 ,

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.17})$$

Estas últimas equações fornecem

$$\varphi = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{(E - m_0 c^2)}\chi, \quad (\text{A.18})$$

$$\chi = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{(E + m_0 c^2)}\varphi. \quad (\text{A.19})$$

Substituindo a Eq. (A.19) na Eq. (A.18) resulta a relação de dispersão,

$$-\left(\frac{E}{c}\right)^2 + m_0^2 c^2 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = 0. \quad (\text{A.20})$$

Como $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = p^2$, temos que

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}, \quad (\text{A.21})$$

observando que é relação clássica para a energia relativística da partícula e anti-partícula livre.

As matrizes α^i e β servem de base para definir as matrizes de Dirac, conhecidas como matrizes gama,

$$\beta = \gamma^0, \quad \gamma^i = \beta \alpha^i, \quad (\text{A.22})$$

onde

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.23})$$

que podem ser rotuladas numa representação covariante γ^μ , sendo μ um índice de Lorentz. As matrizes γ^μ satisfazem a seguinte relação de anticomutação:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} 1_{4x4}, \quad (\text{A.24})$$

com $g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$ sendo o tensor métrico. Outras duas propriedades podem ser obtidas, tais como

$$(\gamma^i)^2 = -1, \quad (\gamma^0)^2 = 1. \quad (\text{A.25})$$

Podemos definir uma outra matriz de Dirac, $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$, que tem a forma:

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & 1_{2x2} \\ 1_{2x2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

e anti-comuta com qualquer matriz γ^μ , ou seja, $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$. As matrizes γ^μ possuem traço nulo, $Tr(\gamma^\mu) = 0$, e satisfazem as seguintes propriedades:

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\nu, \quad \gamma^{\mu\dagger} = \gamma_\mu. \quad (\text{A.27})$$

Em termos das matrizes γ^μ a equação de Dirac é escrita como

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + m_0c)\psi = 0. \quad (\text{A.28})$$

No espaço dos momentos, $p_\mu \rightarrow -i\hbar\partial_\mu$, a equação de Dirac assume a forma:

$$(\gamma^\mu p_\mu - m_0c)\psi(x) = 0. \quad (\text{A.29})$$

As soluções de onda plana são encontradas fazendo-se

$$\varphi = U = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.30})$$

onde $u_1, u_2 \in \mathbb{C}$, e usando a Eq. (A.19) obtemos a solução espinorial de onda,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = N \begin{bmatrix} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{(E+m_0c^2)} U \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = u(E, p) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}, \quad (\text{A.31})$$

com

$$u(E, p) = N \begin{bmatrix} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{(E+m_0c^2)} U \end{bmatrix}, \quad (\text{A.32})$$

onde N é a constante de normalização que é determinada pela seguinte relação:

$$\int \psi(x, t)^* \psi(x, t) d^3x = \delta(p - p'), \quad (\text{A.33})$$

$$u(E, p)^\dagger u(E', p') = 1, \quad (\text{A.34})$$

o que implica em

$$N = \sqrt{\frac{E + m_0c^2}{2E}}. \quad (\text{A.35})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Alan Kostelecky, Ralf Lehnert, "*Stability, Causality, and Lorentz and CPT Violation*", <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.63.065008>
- [2] Brading, Katherine; Elena Castellani. *Symmetries in physics: phylosofical reflections*. Cambridge University Press; 1ª edição, (8 de Dezembro de 2003)
- [3] Don Colladay, Alan Kostelecky, "*CPT violation and standard model*", <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.55.6760>
- [4] Don Colladay, Alan Kostelecky, "*Lorentz-Violating Extension of the Standard Model*", <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.58.116002>
- [5] Don Colladay, Patrick McDonald, "*Redefining spinors in Lorentz-violating quantum electrodynamics*", <https://doi.org/10.1063/1.1477938>
- [6] D. S. Saxon and R. A. Hutner, *Some eletronic properties of a one-dimensional crystal model*, Philips Res. Rep, 4, 81-122, (1949).
- [7] Fairbairn W. M., Glasser M.L., Steslicka M., *Relativistic theory of surface states*, Surf. Sci. 36, 462 (1973)
- [8] Feynman, Richard P. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. 1: Mainly Mechanics, Radiation, and Heat*. Addison Wesley; 1ª edição (11 de Fevereiro de 1977).
- [9] Gasiorowicz, Stephen. *Quantum Physics*. Wiley; 3ª edição (17 de Abril de 2003).
- [10] H. Belich¹, T. Costa-Soares, M.A.Santos,M.T.D. Orlando, "*Violação da simetria de Lorentz*", <http://www.sbfisica.org.br/rbef/pdf/060610.pdf>
- [11] Kittel, Charles *Introdução a física do estado sólido*. LTC; 8ª edição (12 de junho de 2006).
- [12] M. A. Ajaib, *Understanding Lorentz violation with Rashba interaction*, <https://doi.org/10.1142/S0217751X12501394>
- [13] M. A. Ajaib, *Lorentz violation and Condensed Matter Systems*, arXiv:1403.7622
- [14] M. L. Glasser and S. G. Davison, *Analytic Solution of the Dirac Equation for the Kronig-Penney Potential*, Int. J. Quan. Chem. 111, 867-877 (1970).
- [15] Manoel M. Ferreira Jr, Fernando M.O. Moucherek, *Influence of Lorentz- and CPT-violating terms on the Dirac equation*, <https://doi.org/10.1142/S0217751X06033842>
- [16] Merzbacher, Eugene. *Quantum Mechanics*. Willey; 3ª edição (1997).
- [17] Ryder, Lewis H. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press; 2ª edição (13 de junho de 1996).
- [18] Robert Bluhm, Alan Kostelecky, Charles Lane, *Testing CPT with Anomalous Magnetic Moments*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.1432>

- [19] Robert Bluhm, Alan Kostelecky, Charles Lane, *CPT and Lorentz Tests in Hydrogen and Antihydrogen*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.2254>
- [20] Robert Bluhm, Alan Kostelecky, Charles Lane, *CPT and Lorentz tests with muons*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1098>
- [21] Rodolfo Casana, M.M.Ferreira Jr., Edilberto O.Silva, *Generation of geometrical phases and persistent spin currents in 1-dimensional rings by Lorentz-violating terms*, <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2015.04.053>
- [22] Rubakov, Valery; Wilson, Stephen S. *Classical Theory of Gauge Fields*. Princeton University Press. (2 de julho de 2002)
- [23] S.M. Carroll, G.B. Field, and R. Jackiw, Phys. Rev. D 41, 1231 (1990). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.41.1231>
- [24] Strange, Paul. *Relativistic Quantum Mechanics: With Applications in Condensed Matter and Atomic Physics*. Cambridge University Press; 2ª edição (13 de novembro de 1998).
- [25] Subramanian R. e Bhagwat K. V., *Relativistic Generalization of the Saxon-Hutner Theorem*, <https://doi.org/10.1002/pssb.2220480139> (1971)
- [26] V. Alan Kostelecký and Stuart Samuel, *Spontaneous breaking of lorentz symmetry in string theory*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.39.683>
- [27] V. Alan Kostelecký and Charles D. Lane, *Nonrelativistic quantum Hamiltonian for Lorentz violation*, <https://doi.org/10.1063/1.533090>
- [28] V. A. Kostelecky and M. Mewes, "Signals for Lorentz violation in electrodynamics", Phys. Rev. D 66, 056005 (2002); V.A. Kostelecky & M. Mewes, Phys. Rev. Lett. 87, 251304 (2001).
- [29] Zhi Xiao, *The Impact of Lorentz Violation on the Klein Tunneling Effect*, arXiv:1607.03749
- [30] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics: wave equations*, Springer-Verlag, Berlin, 1997