

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

CAMILA CORREIA SOARES LINHARES

**ESTUDO TEÓRICO DOS FÉRMIONS DE DIRAC SEM
MASSA EM UMA FITA DE GRAFENO COM GEOMETRIA
HELICOIDAL**

São Luís
2024

CAMILA CORREIA SOARES LINHARES

**ESTUDO TEÓRICO DOS FÉRMIONS DE DIRAC SEM
MASSA EM UMA FITA DE GRAFENO COM GEOMETRIA
HELICOIDAL**

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão para obtenção do título de Doutora em Física.

Orientador: Prof. Dr. Luis Rafael Benito Castro

Coorientador: Prof. Dr. Angel Eduardo Obispo Vásquez

São Luís

2024

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

Linhares, Camila Correia Soares.

Estudo Teórico dos Férmions de Dirac Sem Massa Em Uma Fita de Grafeno Com Geometria Helicoidal / Camila Correia Soares Linhares. - 2024.

104 f.

Corientador(a) 1: Angel Eduardo Obispo Vásquez.

Orientador(a): Luís Rafel Benito Castro.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-graduação em Física/ccet, Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2024.

1. Férmions de Dirac. 2. Equação de Dirac. 3. Grafeno. 4. Helicoide. 5. . I. Castro, Luís Rafel Benito. II. Vásquez, Angel Eduardo Obispo. III. Título.

CAMILA CORREIA SOARES LINHARES

**ESTUDO TEÓRICO DOS FÉRMIONS DE DIRAC SEM
MASSA EM UMA FITA DE GRAFENO COM GEOMETRIA
HELICOIDAL**

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão para obtenção do título de Doutora em Física.

Orientador: Prof. Dr. Luis Rafael Benito Castro

Coorientador: Prof. Dr. Angel Eduardo Obispo Vásquez

Aprovada em de de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Luis Rafael Benito Castro (Presidente - Orientador)

Doutor em Física - Universidade Federal do Maranhão (UFMA)

Prof. Angel Eduardo Obispo Vásquez (Examinador Externo - Coorientador)

Doutor em Física - Universidad Tecnológica del Perú (UTP)

Prof. Diego Paiva Pires (Examinador Interno)

Doutor em Física - Universidade Federal do Maranhão (UFMA)

Prof. Fabiano Francisco dos Santos (Examinador Interno)

Doutor em Física - Universidade Federal do Maranhão (UFMA)

Prof. Cleverson Filgueiras (Examinador Externo)

Doutor em Física - Universidade Federal de Lavras

Prof. Valdir Barbosa Bezerra (Examinador Externo)

Doutor em Física - Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

*À todas as mães.
Especialmente às mães estudantes, graduandas, mestrandas e doutorandas.
É IMENSURÁVEL o tamanho da DIFICULDADE,
é INJUSTO a INCOMPREENSÃO de alguns,
é INDIGNO a COMPARAÇÃO.*

Sintam-se ABRAÇADAS.

As ENTENDO perfeitamente.

Mas vocês conseguem!

NÓS SEMPRE CONSEGUIMOS!

Pois o nosso combustível se chama:

AMOR PELOS FILHOS.

P.S.: *Não esqueci de vocês mães, que “optaram” ficar pelo meio do caminho:*

NÃO SE CULPEM! NÃO SE SINTAM INFERIORES!

Vocês são BEM MAIS que um título!

E, quando puderem, voltem, SE QUISEREM!

AGRADECIMENTOS

Durante todo o tempo de construção da presente tese, afirmo categoricamente: a parte mais difícil de ser escrita foi esta que vos apresento. Ouso comparar a um seriado de longas temporadas, em que a cada ano que passa, o enredo vai mudando e os personagens também. Mas acho que agora, apresento-lhes as personagens principais, que ajudaram na construção dessa história tão longa, cujos agradecimentos são indispensáveis.

Agradeço primeiramente ao meu Deus, que pela sua infinita misericórdia e bondade deu-me forças para que até aqui eu ficasse de pé e conquistasse mais este título. E me ensinou que “a tribulação produz a paciência, e a paciência a experiência, e a experiência a esperança.” (Bíblia Sagrada, Romanos 5.3-4).

Agradeço aos meus pais, Orlando Costa Soares e Neide Euzébia Correia Soares, principais intercessores e apoiadores nesta jornada. Além disso, excelentes avós, que não se negaram em dar seu tempo para cuidar da minha filha nas minhas horas de trabalho. Amo vocês. “Os filhos dos filhos são uma coroa para os idosos, e os pais são o orgulho dos seus filhos.” (Provérbios 17.6).

Ao meu esposo, Prof. Me. José do Nascimento Linhares Soares cujas conversas foram de suma relevância nos momentos (não poucos) em que cogitei abandonar o barco. Obrigada por me acalmar nos momentos de stresse e mau-humor. Obrigada por muitas vezes abrir mão de seus interesses para que os meus fossem concretizados. Obrigada por ser um pai amoroso, cuidadoso e responsável para com a nossa filha. Te amo. “Melhor é serem dois do que um, porque têm melhor paga do seu trabalho. Porque, se um cair, o outro levanta o seu companheiro; mas ai do que estiver só; pois, caindo, não haverá outro que o levante.” (Bíblia Sagrada, Eclesiastes 4.9-10).

À minha filha, Maria Clara Soares Linhares, que, nasceu em meio a esse caos e, mesmo sem saber, foi, e é, meu combustível diário. Obrigada pelo seu sorriso sincero, pelo seu abraço quentinho e até pelas birras. Te amo filha. Por você não desisti, por você cheguei até aqui, para que, um dia, se orgulhe de mim.

À minha sogra, Antonia do Nascimento, que sempre “salvou” nosso almoço, nos momentos em que as tarefas acadêmicas entravam em conflito com as domésticas. Só Deus para lhe recompensar pela sua boa vontade. “E, tudo quanto fizerdes, fazei-o de todo o coração, como ao Senhor e não aos homens, sabendo que recebereis do Senhor o galardão da herança, porque a Cristo, o Senhor, servis.” (Bíblia Sagrada, Colossenses 3.23-24).

À uma grande amiga, minha segunda mãe, intercessora, que desde a graduação me chamava de “doutora”, Nilzinete Lisboa Silva ou simplesmente irmã Nilza (*in memoriam*). Infelizmente, e com lágrimas nos olhos escrevo isso, não está mais presente para saber que suas orações foram ouvidas. Nós conseguimos! Te amarei para sempre.

Ao meu orientador Prof. Dr. Luis Rafael Benito Castro, por ter aceitado o desafio de me orientar, pelo tema proposto e por toda a orientação e atenção concedida. Obrigada pela paciência, sinceridade, transparência, profissionalismo e ética. “Lança teu pão sobre as águas, porque depois de muitos dias o acharás.” (Bíblia Sagrada, Provérbios 11.1).

Ao meu coorientador Prof. Dr. Angel Eduardo Obispo Vásquez, cujas conversas foram de fundamental importância para a conclusão do presente trabalho. Obrigada por compartilhar seus conhecimentos, pela sua paciência e atenção. “E não nos cansemos de fazer o bem, pois no tempo próprio colheremos, se não desanimarmos.” (Bíblia Sagrada, Gálatas 6.9).

Ao Instituto Federal do Maranhão (IFMA), campus Zé Doca, por ter-me liberado das minhas funções para concluir o presente doutorado, cuja retribuição será dada em ensino, pesquisa e extensão de qualidade para o fortalecimento e crescimento de umas das maiores e melhores instituições públicas do Brasil.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão (PPGF - UFMA) pela estrutura concedida e pelos profissionais, docentes e administrativo, que fazem com que o curso tenha um nível de excelência, destacando aqui o coordenador do programa, Prof. Dr. Manoel Messias Ferreira Júnior, por toda ética, competência, diálogo e transparência frente às intercorrências ao longo dos meus últimos anos neste curso.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa.

*“Porque ainda que a figueira não floresça, nem haja fruto na vide;
ainda que decepcione o produto da oliveira, e os campos não produzam mantimento;
ainda que as ovelhas da malhada sejam arrebatadas, e nos currais não haja gado;
Todavia eu me alegrarei no Senhor; exultarei no Deus da minha salvação.
O Senhor Deus é a minha força, e fará os meus pés como os das cervas, e me fará andar
sobre as minhas alturas. (...)”*

(Bíblia Sagrada, Habacuque 3.17-19)

Resumo

No presente trabalho, o movimento quântico relativístico de férmions sem massa em uma fita helicoidal sob a influência de um campo magnético uniforme é investigado. Considerando um campo magnético uniforme (B) alinhado ao longo do eixo x do helicoide, este problema é explorado no contexto da equação de Dirac em um espaço-tempo curvo. Como este sistema não suporta soluções exatas devido ao pano de fundo considerado, as soluções de estados ligados e densidade local de estado (LDOS, do inglês *local density of states*) são obtidas numericamente por meio do método de Numerov. Os efeitos combinados de largura da fita (D), comprimento da fita (L), parâmetro de torção (ω) e B nas equações de movimento e LDOS são analisados e discutidos. Verifica-se que a presença de B produz um valor mínimo constante de LDOS no eixo do helicoide, o que só é possível para valores suficientemente grandes de ω , ao contrário do caso para $B = 0$ já estudado na literatura. Além disso, informações sobre o ângulo de torção são obtidas a partir do estudo da energia elástica, onde, usa-se uma metodologia capaz de vincular a Teoria da Elasticidade com a Relatividade Geral, em que, encontra-se uma expressão para a energia elástica na parametrização do helicoide. Observa-se que a energia elástica é contínua com relação ao ângulo de torção e que, para mais detalhes sobre transições de fase e ângulo crítico, seria necessária uma abordagem via cálculo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*).

Abstract

In the present work, the relativistic quantum motion of massless fermions in a helicoidal strip under the influence of a uniform magnetic field is investigated. Considering a uniform magnetic field (B) aligned along the axis of helicoid, this problem is explored in the context of Dirac equation in a curved space-time. As this system does not support exact solutions due to considered background, the bound-state solutions and local density of state (LDOS) are obtained numerically by means of Numerov method. The combined effects of width of the strip (D), length of ribbon (L), twist parameter (ω) and B on the equations of motion and local density of states (LDOS) are analyzed and discussed. It is verified that the presence of B produces a constant minimum value of local density of state on the axis of helicoid, which is possible only for values large enough of ω , in contrast to the case for $B = 0$ already studied in the literature. Furthermore, the information on the twist angle is obtained from the study of elastic energy, where a methodology capable of linking the Theory of Elasticity with General Relativity is used, in which an expression for the elastic energy in the parameterization of the helicoid. It is observed that the elastic energy is continuous with respect to the twist angle and that, for more details on phase transitions and critical angle, an approach via DFT (Density Functional Theory) calculation would be necessary.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação esquemática das estruturas químicas da grafite (à esquerda) e bastões de grafite (à direita). (Fonte: Guia dos entusiastas da ciência. Disponível em: < https://gec.proec.ufabc.edu.br/o-que-que-a-ciencia-tem/tenho-direito-a-quatro-ligacoes-disse-o-carbono/ >)	21
Figura 2 – Representação esquemática das estruturas químicas do diamante (à esquerda) e uma gema de diamante (à direita). (Fonte: Guia dos entusiastas da ciência. Disponível em: < https://gec.proec.ufabc.edu.br/o-que-que-a-ciencia-tem/tenho-direito-a-quatro-ligacoes-disse-o-carbono/ >)	22
Figura 3 – Representação esquemática das estruturas químicas do fulereno. (Fonte: Wikitionary. Disponível em: < https://pt.wiktionary.org/wiki/buckminsterfulereno >)	23
Figura 4 – Representação esquemática das estruturas químicas do nanotubo de carbono. (Fonte: Brasil Escola. Disponível em: < https://brasilecola.uol.com.br/quimica/nanotubo-de-carbono.htm >)	24
Figura 5 – Representação esquemática das estruturas químicas do grafeno. (Fonte: Computer Word. Disponível em: < https://computerworld.com.br/plataformas/mackenzie-investe-r-100-milhoes-em-centro-de-pesquisa-em-grafeno/ >)	25
Figura 6 – Estrutura cristalina do grafeno construído como uma superposição de duas sub-redes triangulares A e B , com vetores-base \vec{a}_i para a rede A e vetores \vec{s}_i conectando A com B . (Fonte: Vásquez (2016))	26
Figura 7 – Rede recíproca do grafeno. (Fonte: Dartora, Jimenez e Zanella (2015))	26
Figura 8 – Estrutura de banda do grafeno a partir do modelo <i>tight-binding</i> . (Fonte: Vásquez (2016))	29
Figura 9 – Helicoide no espaço euclidiano tridimensional.	34
Figura 10 – Potenciais efetivos da fita helicoidal para $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$ (painel superior) e $\omega = 3,0 \text{ rad/nm}$ (painel inferior).	39
Figura 11 – PLDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$ (painel à esquerda) e $\omega = 2,0 \text{ rad/nm}$ (painel à direita), sendo $l = 1$, $E = \sqrt{2,5} \text{ eV}$	44
Figura 12 – Helicoide no espaço euclidiano tridimensional.	46
Figura 13 – Potencial efetivo de uma fita helicoidal para $l = 1$, $B = 0,8 T$ e $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$	49
Figura 14 – LDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 0,5 \text{ rad/nm}$ (linha preta) e $\omega = 3,5 \text{ rad/nm}$ (linha azul) e $\omega = 10,0 \text{ rad/nm}$ (linha vermelha), sendo $l = 1$, $B = 0,5 T$ (painel à esquerda) e $B = 0,8 T$ (painel à direita).	50
Figura 15 – LDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 10 \text{ rad/nm}$, $l = 1$, $B = 0$	50

- Figura 16 – Perfil da energia elástica E_{el} de uma fita de grafeno helicoidal em função do ângulo de torção θ , com largura fixa D e comprimentos $L = \pi nm$ (linha cheia), $L = 3\pi nm$ (linha tracejada) e $L = 5\pi nm$ (linha traço-ponto). Notemos que E_{el} aumenta progressivamente em todos os casos, porém, para $L = 3\pi nm$, a curva da E_{el} aumenta mais rapidamente para ângulos menores quando comparado com $L = 5\pi nm$ 63
- Figura 17 – Perfil da energia elástica E_{el} de uma fita de grafeno helicoidal em função do ângulo de torção θ , com comprimento fixo L e larguras $D = 8 nm$ (linha cheia), $D = 12 nm$ (linha tracejada) e $D = 16 nm$ (linha traço-ponto). Observamos que a energia elástica, em um determinado intervalo do ângulo de deformação θ , muda lentamente para larguras maiores, e vice-versa. . . . 63
- Figura 18 – O tensor A^μ é transportado num espaço com curvatura, porém, o tensor transportado $A^\mu + \delta A^\mu$ não é paralelo a A^μ . Logo, por meio da conexão afim $\Gamma_{\nu\lambda}^\mu$, gera-se um tensor paralelo a A^μ definido como $A^\mu + \bar{\delta}A^\mu$ como se estivéssemos num espaço plano, onde $\bar{\delta}A^\mu = \Gamma_{\nu\lambda}^\mu A^\nu dx^\lambda$ 88

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
2	GRAFENO: CARACTERÍSTICAS, FORMULAÇÃO FÍSICA E ESPAÇO CURVO	19
2.1	Grafeno: um material genuinamente bidimensional	19
2.2	O carbono e suas formas alotrópicas	20
2.2.1	Grafite	21
2.2.2	Diamante	21
2.2.3	Fulereo	22
2.2.4	Nanotubos de carbono	23
2.2.5	Grafeno	24
2.3	Formulação física do grafeno (estrutura e modelo <i>tight-binding</i>)	25
2.3.1	Modelo de Dirac para o grafeno	30
2.4	Equação de Dirac no espaço curvo	31
3	FÉRMIONS SEM MASSA EM UMA FITA DE GRAFENO COM GEOMETRIA HELICOIDAL	33
3.1	Caso livre	34
3.1.1	Equação de Dirac para uma geometria helicoidal	34
3.1.2	Densidade de estados	39
3.1.2.1	Funções de Green	40
3.1.2.2	Construção da densidade local de estados	42
3.1.2.3	Densidade local parcial de estados para uma partícula livre	43
3.2	Férmions sem massa em uma fita de grafeno com geometria helicoidal na presença de um campo magnético	44
3.2.1	Fita helicoidal na presença de um campo magnético uniforme	44
3.2.1.1	Formalismo	44
3.2.1.2	Campo magnético paralelo ao eixo da fita helicoidal	46
3.2.1.3	Aplicação: densidade local de estados (LDOS)	49
4	ENERGIA ELÁSTICA PARA O HELICOIDE	52
4.1	Tensor de deformação	52
4.2	Tensor de tensão	55
4.3	A termodinâmica da deformação	56
4.4	Expansão da densidade de energia livre	57
4.5	Energia elástica para o helicoide	59

	CONSIDERAÇÕES FINAIS	64
	REFERÊNCIAS	66
	APÊNDICES	71
	A – EQUAÇÃO DE DIRAC	72
A.1	Equação de Dirac no espaço plano	72
A.2	Equação de Dirac no espaço curvo	81
A.2.1	Grupo de Lorentz	81
A.2.2	Formalismo das tetradas	85
A.2.2.1	Conexões	87
A.2.2.2	Postulado das tetradas	89
A.2.3	Equação de Dirac no espaço curvo	90
	B – MÉTODO DE NUMEROV	92
	ANEXOS	94
	A – EFFECTS OF A UNIFORM MAGNETIC FIELD ON TWISTED GRAPHENE NANORIBBONS	95

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O avanço tecnológico tem facilitado a humanidade em todos os sentidos. Com ele, a necessidade de realizar tarefas das mais básicas às mais complexas de forma rápida e eficiente também surgem. Para isso, a construção de equipamentos versáteis, leves e portáteis é necessária. Desse modo, o surgimento de componentes cada vez menores e resistentes vem crescendo para que se tenha produtos eficazes e de qualidade. Esse fenômeno acontece graças à nanociência e nanotecnologia que permitem construir objetos na escala nanométrica¹ e estudar as propriedades da matéria nessa escala, tendo em vista que estas, em sua maioria, são diferentes da escala macroscópica.

Na última década a nanociência abriu um vasto campo de pesquisa nas áreas da Física, Química, Biologia e Engenharias onde o interesse é o estudo de materiais que cumpram as exigências dessas novas tecnologias, como o carbono, por exemplo (NI et al., 2022; SOROKINA; OBRAZTSOVA, 2022; SANTONOCITO et al., 2022). Esse material torna-se um dos mais pesquisados atualmente por ser um dos elementos mais versáteis encontrados na natureza. Isso porque pode apresentar-se em diferentes estruturas na escala nanométrica devido a sua organização espacial e ainda possuir propriedades peculiares (SILVA, 2017).

Em se tratando dessas propriedades, uma das formas do carbono que ganha destaque é o grafeno. Isso porque é um material genuinamente bidimensional, o que permite, a partir dele, a sintetização de outros materiais em outras dimensões e também, por conta do seu espectro diferenciado, torna-se um “simulador” de fenômenos físicos relativísticos (FIALKOVSKIY, 2012). Este último, é objeto de estudo no campo da Física de Partículas e Campos, pois a forma em que os elétrons deste material se comportam na velocidade de Fermi e em baixas energias é análoga aos férmions de Dirac sem massa (DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015; GALLERATI, 2019). Isso possibilita a melhor compreensão

¹ Uma escala nanométrica é da ordem de $10^{-9}m$, ou seja, um metro dividido por um bilhão. Quando falamos de nanociência e nanotecnologia, nos reportamos ao estudo de materiais nessa escala.

da física de altas energias em matéria condensada, por exemplo. Outra possibilidade que o grafeno nos traz é que este mostra uma estrutura real do que possa ser o mais próximo possível de um campo quântico em um espaço-curvo (IORIO; LAMBIASE, 2014; GALLERATI, 2019).

Essa representação “palpável” de um campo quântico no espaço-curvo pode ser feita por meio do estudo das deformações do grafeno. Tais deformações podem ser locais ou globais (ZHANG et al., 2020). As deformações locais podem ocorrer por meio das disclinações, um tipo de defeito topológico em curvaturas não-nulas, onde é possível inserir material num plano, denominada disclinação positiva, ou retirar material desse plano, conhecida como disclinação negativa, nesse caso, as superfícies livres do plano são forçadas, devido a uma valor de energia considerável, a moldar-se como um cone (SOUSA, 2019). Vozmediano, Katsnelson e Guinea (2010) afirmam que, no grafeno, a partir da modelagem de “recorte e cole”, é possível estudar o comportamento dos elétrons na área do “corte”.

No caso de uma deformação global, toda a folha do grafeno é deformada por algum fator externo e é interessante estudar o comportamento das funções de onda devido à essa deformação. Segundo Aoki et al. (2001), o interesse em estudar partículas ligadas à superfícies curvas se dá por dois motivos: o primeiro é que o movimento das partículas é afetado pela curvatura local da superfície e o segundo é que a deformação da superfície afeta as funções de onda (AOKI et al., 2001). Watanabe et al. (2015) confirmam isso apresentando mais dois motivos: i) nas superfícies curvas com periodicidade, os elétrons não relativísticos apresentam estruturas eletrônicas distintas; ii) como os férmions de Dirac apresentam estados de energia positiva e negativa, é interessante ver os efeitos que isso pode causar nessas superfícies.

No ponto de vista matemático, a escolha da superfície curva influencia na simplificação de representações e equações matemáticas. Uma superfície periódica simples, por exemplo, simplifica a equação de Schrödinger, como é mostrado em Aoki et al. (2001) e abordado em Jr et al. (2020) em que se resolveu esta equação para uma partícula numa geometria helicoidal. A escolha do helicóide nesse caso se deu por ser um tipo de superfície periódica simples, cuja aplicabilidade é vasta principalmente com relação ao grafeno nessa geometria. Como exemplo, temos o trabalho de Atanasov e Saxena (2015) que estudaram nanofitas helicoidais a fim de saber que tipo de potencial efetivo interage com os portadores de carga num grafeno helicoidal devido à curvatura e torção. No campo da Óptica, o estudo do grafeno e de filmes helicoidais anisotrópicos mostra vantagens para ajustar de forma eficaz a reflexão de onda da luz e as propriedades de transmissão (GU; WANG; YIN, 2014). O elo entre a Relatividade e Matéria Condensada é mostrado em Watanabe et al. (2015) que estudaram a estrutura eletrônica do grafeno com simetria helicoidal, onde um dos pontos de interesse é a discussão sobre a densidade local de estados (LDOS). Tal discussão é relevante tendo em vista que a densidade de estados (DOS) é uma grandeza

que nos permite visualizar as funções de onda de espectros contínuos de um dado sistema, o que é de grande utilidade para a análise das propriedades eletrônicas dos sólidos.

Podemos citar ainda, trabalhos importantes relacionados aos efeitos combinados da geometria helicoidal e campos externos de fundo, por exemplo, partículas confinadas em uma fita de grafeno helicoidal interagindo com o potencial da Costa (ATANASOV; DANDOLOFF; SAXENA, 2009); a emergência de níveis pseudo-Landau devido a um campo pseudomagnético induzido por deformação (ZHANG; SEIFERT; CHANG, 2014); o grafeno helicoidal na presença de duas configurações de campo magnético específicas: um campo constante e um campo variável, ambos circundantes ao eixo do helicoido (SULANGI; JR, 2012). Inspirados nesses trabalhos, propomos, por meio de cálculos numéricos, explorar a dinâmica de partículas sem massa em $(2 + 1)$ dimensões numa superfície de grafeno com geometria helicoidal na presença de um campo magnético uniforme alinhado ao longo do eixo do helicoido. Analisamos o comportamento dos potenciais efetivos para alguns valores do campo magnético (B) e do parâmetro de torção (ω), calculamos a densidade local de estados (LDOS) como um ponto de convergência entre a Relatividade Geral e a Física da Matéria Condensada, semelhante ao realizado por (WATANABE et al., 2015). A partir deste estudo, um comportamento inesperado e contraintuitivo do LDOS é encontrado. Assim, concluímos que este novo resultado poderia ser uma consequência da escolha da configuração do campo magnético, e, uma possível conexão com a Física da Matéria Condensada é qualitativamente discutida. Em seguida, para estender o nosso estudo a partir dos dados obtidos, fazemos um elo entre a Teoria da Elasticidade e a Relatividade Geral onde encontramos a energia elástica E_{el} para o helicoido. A partir disso, analisamos o perfil desta energia com relação ao ângulo de torção θ , e fazemos uma discussão quantitativa a seu respeito.

A presente tese está dividida em 4 capítulos a incluir esta introdução que consiste no primeiro capítulo. No capítulo 2, fazemos um breve estudo sobre o elemento químico carbono e da sua versatilidade na forma de se apresentar na natureza, dando destaque às suas formas alotrópicas. Tais formas são oriundas de um processo denominado *hibridização*, que une orbitais atômicos incompletos. Esse processo permite que o carbono realize quatro ligações químicas. Dependendo de como ocorrem essas ligações, o carbono toma uma forma diferente. As formas alotrópicas mais conhecidas são: grafite, diamante, fulereno, nanotubos de carbono e grafeno, onde esta última forma representa o objeto de estudo do presente trabalho. Ainda neste capítulo, apresentamos a formulação física do grafeno via modelo *tight-binding*, que é uma abordagem para o cálculo de estrutura de banda eletrônica, onde as funções de onda localizadas em torno de cada sítio da rede atômica são as funções de base utilizadas na expansão dos operadores de campo (MIYAZAKI et al., 2022). A partir desse modelo, verificamos que os elétrons do grafeno comportam-se como férmions de Dirac sem massa na velocidade de Fermi. Desse modo, estudamos o modelo de Dirac para o grafeno e em seguida, escrevemos a equação de Dirac para o grafeno no

espaço curvo devido à deformação global que este material apresenta: um helicóide.

No capítulo seguinte, dividimos nosso estudo em dois casos: i) estudamos a dinâmica dos portadores de carga livres numa fita de grafeno sobre uma geometria helicoidal; ii) estudamos a dinâmica dos portadores de carga submetidos à um campo magnético uniforme (B), paralelo ao eixo x , na mesma geometria. Iniciamos com o desenvolvimento da equação de Dirac para o helicóide, onde encontramos duas equações supersimétricas do tipo Schrödinger, cuja solução analítica não é conhecida devido à geometria apresentada. Assim, para calcularmos o potencial efetivo (V) e densidade de estados (ρ), utilizamos o método de Numerov. No caso livre, ajustamos o cálculo de V e ρ para diferentes valores do parâmetro de torção ω . No caso dos férmions interagindo com B , ajustamos V e ρ para diferentes valores de ω e B . Fixamos os valores da largura (D) e do comprimento (L) da fita para as duas situações. Os resultados obtidos concentram-se no valor do parâmetro de torção ω , que possui um valor limite para que não haja uma transição de fase e são uma extensão do que fizeram [Watanabe et al. \(2015\)](#), que mostraram a inexistência de estados ligados para o caso de elétrons de Dirac sem massa no helicóide, tendo em vista que não interagem com campos externos.

No capítulo 4, fazemos um breve estudo sobre a teoria da elasticidade, apresentando o tensor de deformação (u_{ik}) e o tensor de tensão (σ_{ik}). Em seguida, estudamos a termodinâmica da deformação e expansão da densidade de energia livre para encontrarmos a expressão da energia elástica. Seguimos o nosso estudo reescrevendo a energia elástica em função da parametrização do helicóide. Para isso, relacionamos o tensor de tensão e a métrica no espaço curvo, fazendo assim, uma conexão entre os conceitos da Teoria da Elasticidade com a Relatividade Geral. Em seguida, analisamos o comportamento da energia elástica frente ao ângulo de torção θ . Finalizamos o presente trabalho com as considerações finais.

CAPÍTULO 2

GRAFENO: CARACTERÍSTICAS, FORMULAÇÃO FÍSICA E ESPAÇO CURVO

Apresentamos no presente capítulo as principais formas alotrópicas do carbono, dando destaque ao grafeno. Em seguida, vemos a formulação física do grafeno por meio do modelo *tight-binding* (ligações fortes). Calculamos seu espectro de energia e chegamos ao modelo de Dirac para este material no espaço plano. Além disso, escrevemos a equação de Dirac no espaço curvo para descrever o comportamento dos férmions no grafeno, quando este apresenta defeitos estruturais.

2.1 Grafeno: um material genuinamente bidimensional

O grafeno tem sido objeto de estudo nas mais diversas áreas de conhecimento tecnológico, principalmente por pesquisadores da Física da Matéria Condensada e Ciências dos Materiais (GUINEA; HOROVITZ; DOUSSAL, 2008; DINIZ, 2014; ZHAN *et al.*, 2017; ZHANG *et al.*, 2020). Isso se dá pelo fato deste material, que é uma das formas cristalinas do carbono, ter características interessantes que vão da resistência mecânica extrema e condutividade térmica a características eletrônicas peculiares. Seu descobrimento aconteceu em 2004 pelos cientistas André Geim e Konstantin Novoselov, o que trouxe o prêmio Nobel de 2010 (GONG, 2011).

Uma das principais características do grafeno é que ele é um material bidimensional, o que justifica sua sintetização tardia com relação às outras formas do carbono tais como grafite e o diamante. Acreditava-se ser impossível sintetizar um material bidimensional devido à teoria de L. Landau e R. Pierls, que demonstraram teoricamente que um cristal bidimensional se desintegraria no limite termodinâmico, devido às flutuações térmicas dos fônons aumentarem logaritmicamente com o tamanho da amostra (FERNÁNDEZ, 2007). Segundo Fernández (2007), Mermim, Wagner e Hohenberg estenderam este resultado para

sistemas bidimensionais gerais estabelecendo que não existe ordem de longo alcance em duas dimensões.

Porém, ao aplicar a técnica de “descamação” de um cristal de grafite por meio de uma fita adesiva e obter o grafeno com espessura da ordem de dezenas de micrômetros, Geim e Novoselov mostraram que era possível existir um material sintetizado em duas dimensões (VÁSQUEZ, 2016) com apenas uma camada, pois, até então, os materiais considerados bidimensionais possuíam várias camadas atômicas (DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015). Além disso, segundo Dartora, Jimenez e Zanella (2015), foi comprovado experimentalmente que os elétrons do grafeno se comportam como férmions de Dirac sem massa nos chamados pontos de Dirac, isto é, agem como quasi-partículas sendo que a velocidade considerada é a velocidade de Fermi que é aproximadamente $v_F \approx c/300$.

Isso possibilita os estudos sobre como as partículas se comportam na velocidade abaixo da velocidade da luz, cuja consequência é poder medir os efeitos da física de alta energia em um sistema de estado sólido (GALLERATI, 2019). Segundo Gallerati (2019), o grafeno pode nos fornecer uma estrutura real para o estudo do que possa ser o mais próximo possível de um campo quântico em um espaço-tempo curvo, por exemplo. Porém, antes de falarmos do grafeno no espaço-tempo curvo, faremos um breve comentário sobre o carbono e suas formas alotrópicas, em que esse material se insere.

2.2 O carbono e suas formas alotrópicas

Derivada do latim *carbo* cujo significado para os romanos é carvão (ou brasa), a tradução da palavra carbono limita este elemento se compararmos ao grande número de materiais que ele pode constituir, como por exemplo o grafite, o diamante, além de formar o DNA (ácido desoxirribonucleico), que é responsável por toda a nossa informação genética e o RNA (ácido ribonucleico), que controla a síntese de proteínas (SOLOMONS; FRYHLE, 2001; PIERSON, 2012).

A versatilidade do carbono na constituição de diversos materiais se dá pelas diferentes possibilidades de ligações químicas. Isso ocorre devido ao processo de hibridização¹ dos orbitais s e p em sp , sp^2 e sp^3 podendo constituir ligações simples, duplas ou triplas, dependendo do grau de excitação de energia e assim, formar estruturas diversificadas tanto amorfas quanto cristalinas (MUSCELLI, 2012; VÁSQUEZ, 2016). Essas estruturas são denominadas de *formas alotrópicas do carbono* e faremos uma breve discussão sobre cada uma.

¹ Hibridização é um processo que une orbitais atômicos incompletos. No caso do carbono, a hibridização permite que seus átomos realizem quatro ligações químicas (SOLOMONS; FRYHLE, 2001).

2.2.1 Grafite

Iniciamos com a forma mais estável² do carbono, a **grafite**, cuja denominação é originária do grego *graphein*, que significa *escrever*. Isso faz sentido tendo em vista que este material é utilizado em larga escala para a escrita desde o início da história, os primeiros lápis, por exemplo, foram fabricados na Inglaterra no século XV, porém, apenas no século XVIII que foi demonstrado que a grafite é um alótropo do carbono (PIERSON, 2012).

Segundo Pierson (2012), a relevância do grafite se dá pela grande quantidade de materiais que podem ser derivados de sua forma básica como fibras resistentes, lubrificantes, barreiras à prova de gás e adsorventes de gás. Esses materiais são constituídos por infinitas camadas planas de átomos de carbono ligados entre si pelo processo de hibridização sp^2 , onde cada átomo de carbono se liga a três outros átomos no mesmo plano (configuração trigonal plana), formando um arranjo planar de hexágonos fundidos ligados fracamente a partir das forças de Van de Waals, que permite o fácil deslocamento das camadas em forma horizontal (PIERSON, 2012; VÁSQUEZ, 2016), como mostra a Fig. 1.

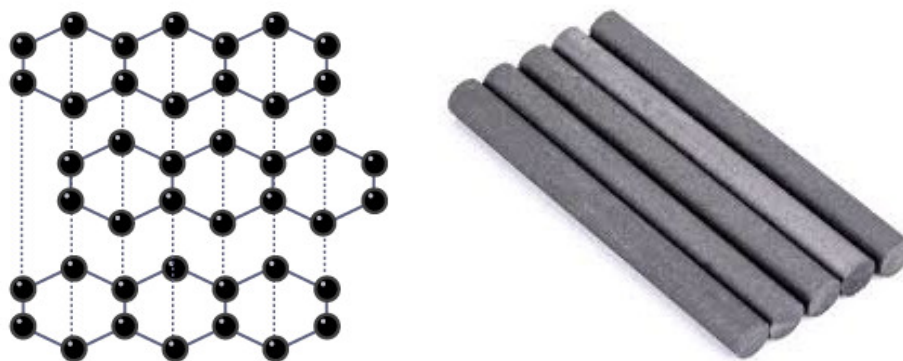


Figura 1 – Representação esquemática das estruturas químicas da grafite (à esquerda) e bastões de grafite (à direita). (Fonte: Guia dos entusiastas da ciência. Disponível em: <<https://gec.proec.ufabc.edu.br/o-que-que-a-ciencia-tem/tenho-direito-a-quatro-ligacoes-disse-o-carbono/>>)

2.2.2 Diamante

A segunda forma alotrópica mais estável³ do carbono é o **diamante** cujas propriedades podem ser sintetizadas, segundo Pierson (2012), da seguinte forma:

- Sua condutividade térmica é maior que a de qualquer sólido em temperatura ambiente, chegando a ser cinco vezes mais condutivo que o cobre;

² Para a formação do seu arranjo, é necessário menos energia, se comparada à outras formas alotrópicas.

³ É menos estável que o grafite pois, para a sua formação, são necessárias condições de pressão e temperatura elevadas, em torno de 105 atm e 2000°C, respectivamente, e a energia necessária é de 2 kJ.

- É o material óptico ideal pois tem a capacidade de transmitir luz na faixa do infravermelho distante ao ultravioleta;
- Seu índice de refração é alto, no valor de 2,42;
- É resistente à radiação de nêutrons;
- É altamente resistente e rígido;
- Possui a maior densidade de número atômico.

Tais propriedades são justificadas pela maneira em que seus átomos se arranjam: existe uma forte ligação covalente tridimensional onde cada átomo está ligado a quatro átomos vizinhos. Os quatro elétrons dispostos em cada átomo para fazer as ligações químicas se organizam a ponto de formarem configurações do tipo sp^3 em uma matriz tetraédrica de tensão (BURCHELL, 1999; VÁSQUEZ, 2016). Por conta da sua estrutura e características já apresentadas, o diamante pode ser visto e utilizado de várias formas: como ferramenta para cortar, moer, lustrar, está presente em dispositivos eletrônicos e até em instrumentos cirúrgicos, e também aparece em forma de joia, tão bem conhecida, como mostra a Fig. 2.

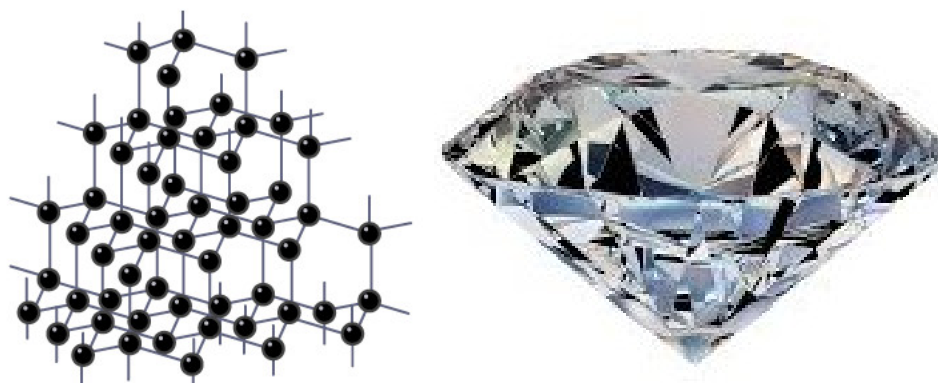


Figura 2 – Representação esquemática das estruturas químicas do diamante (à esquerda) e uma gema de diamante (à direita). (Fonte: Guia dos entusiastas da ciência. Disponível em: <<https://gec.proec.ufabc.edu.br/o-que-que-a-ciencia-tem/tenho-direito-a-quatro-ligacoes-disse-o-carbono/>>)

2.2.3 Fulereno

Considerado como o outro alótropo principal do carbono, cuja forma molecular é estável, finita e discreta⁴, o **fulereno**, também chamado de C_{60} , por ser constituído de 60 átomos de carbono, foi descoberto pelo engenheiro e arquiteto Richard Buckminster Fuller, que desenvolveu estruturas compostas por uma rede de triângulos dispostos de

⁴ A diferença entre o fulereno e os os materiais anteriores (diamante e grafite) é que esses dois não são moleculares, mas sólidos de rede infinita (PIERSON, 2012).

tal maneira a formarem geometrias semelhantes à uma esfera (MUSCELLI, 2012), como mostra a Fig. 3.

Segundo Muscelli (2012), para compreender como acontecia a formação de longas cadeias de carbono no espaço interestelar, Kroto et al. (1985) observaram, com o auxílio da espectrometria de massa, a formação de *clusters* com sessenta átomos de carbono após incidirem um raio laser em um alvo de grafite em que este se vaporizava. Tais clusters foram denominados de fulerenos.

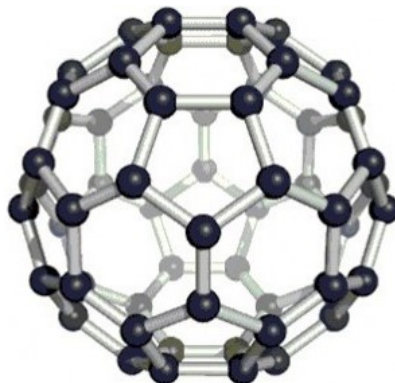


Figura 3 – Representação esquemática das estruturas químicas do fulereno. (Fonte: Wikitionary. Disponível em: <<https://pt.wiktionary.org/wiki/buckminsterfulereno>>)

2.2.4 Nanotubos de carbono

Os **nanotubos de carbono** são estruturas formadas por átomos de carbono na forma cilíndrica e simetria axial que toma a forma de espiral em consequência da helicidade ou quiralidade da rede⁵. As ligações entre os seus átomos é semelhante às da grafite, ou seja, ligação sp^2 . Porém, por conta do seu formato tubular, o nanotubo torna-se mais resistente que a grafite (FONSECA et al., 2011; MUSCELLI, 2012; VÁSQUEZ, 2016), como mostra a Fig. 4. Segundo Fonseca et al. (2011), os nanotubos de carbono podem ser classificados em dois tipos: nanotubos de carbono de parede única (SWCNT, do inglês *single-walled carbon nanotube*), que são constituídos por uma única folha de grafeno; nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNT, do inglês *multi-walled carbon nanotube*), formados por várias folhas de grafeno. Algumas propriedades que estes materiais apresentam são:

- Possuem capacidade de transportar uma corrente elétrica com uma intensidade cerca de mil vezes superior ao cobre;
- São vinte vezes mais resistentes à tensão que o aço;
- Transmitem o dobro do calor que o diamante puro;

⁵ A quiralidade nesse contexto está relacionada à orientação relativa ao eixo do tubo.

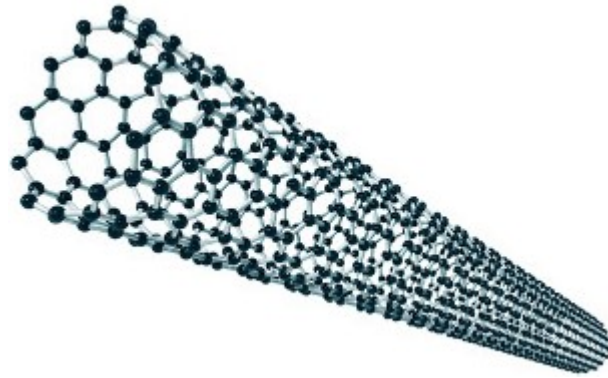


Figura 4 – Representação esquemática das estruturas químicas do nanotubo de carbono. (Fonte: Brasil Escola. Disponível em: <<https://brasilecola.uol.com.br/quimica/nanotubos-carbono.htm>>)

- Possuem uma estrutura estável até aos $3000^{\circ}C$.

2.2.5 Grafeno

Das formas alotrópicas do carbono apresentadas, podemos dizer que a mais relevante é o **grafeno** (Fig. 5), pois, é a estrutura base de outros alótropos como os nanotubos e a grafite, por exemplo. Suas principais propriedades são (VÁSQUEZ, 2016):

- É resistente à ruptura ($42N/m$);
- É quase transparente (absorve apenas 2,3% da intensidade da luz);
- Sua condutividade elétrica é de $0,96 \times 10^6 \Omega^{-1}cm^{-1}$, e sua resistividade é de $1\mu\Omega \cdot cm$, 35% menor que a resistividade do cobre, sendo assim, um excelente condutor;
- Sua condutividade térmica à temperatura ambiente é de aproximadamente $5000 W/mK$, significando que conduz calor 10 vezes mais que o cobre que é considerado um excelente condutor térmico.

Tais peculiaridades originaram vastas pesquisas nas ciências experimentais em busca de aplicabilidade deste material em dispositivos eletrônicos, instrumentos cirúrgicos, cosméticos, entre outros, porém, o estudo do grafeno vai mais além: ele tem se tornado um aliado no estudo da Física Teórica pelo comportamento incomum de seus férmions nos chamados pontos de Dirac, o que traz a representação de um campo quântico no limite de baixas energias.

A seguir, estudaremos o modelo *tight-binding* no grafeno, que consiste em uma ferramenta eficaz para descrever o movimento dos elétrons em sólidos, e assim, demonstraremos que no limite de baixas energias, esses férmions possuem comportamento “relativístico” cujo Hamiltoniano descreve o modelo de Dirac para o grafeno.

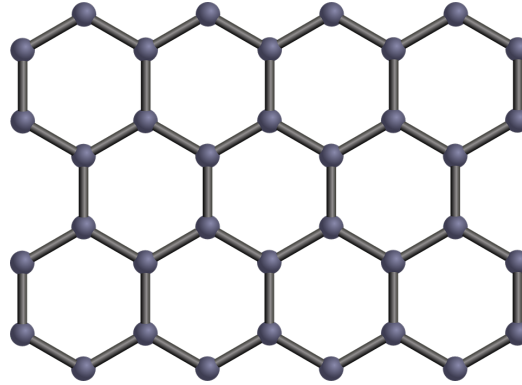


Figura 5 – Representação esquemática das estruturas químicas do grafeno. (Fonte: Computer Word. Disponível em: <<https://computerworld.com.br/plataformas/mackenzie-investe-r-100-milhoes-em-centro-de-pesquisa-em-grafeno/>>)

2.3 Formulação física do grafeno (estrutura e modelo *tight-binding*)

O grafeno é constituído por um arranjo de átomos de carbono em uma rede cristalina do tipo favo de mel (do inglês *honeycomb*). Isso é justificado pela hibridização sp^2 , que já mencionamos anteriormente. Desse modo, a estrutura favo de mel forma uma rede hexagonal bidimensional com base de dois átomos pertencentes respectivamente à duas sub-redes triangulares A e B interconectadas, onde uma é rotacionada com relação à outra em 180° , como mostra a Fig. 6. A base é constituída por um átomo da sub-rede A e um átomo da sub-rede B cuja distância (comprimento de ligação química) é de $a \approx 1,42\text{Å}$ (DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015; VÁSQUEZ, 2016).

Para formar a rede hexagonal e gerar a sub-rede A necessitamos de dois vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 expressos como

$$\vec{a}_1 = a(\sqrt{3}, 0), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3). \quad (2.1)$$

Além disso, temos os vetores relativos entre primeiros vizinhos, ou seja, que ligam um átomo da sub-rede A com seu primeiro vizinho da sub-rede B dados por

$$\vec{s}_1 = a(0, -1), \quad \vec{s}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \vec{s}_3 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1). \quad (2.2)$$

Podemos ainda obter os vetores da rede recíproca (\vec{b}_1, \vec{b}_2) pela definição (KITTEL, 2000)

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \hat{z}}{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, -1), \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\hat{z} \times \vec{a}_1}{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{4\pi}{3a}(0, 1) \end{aligned} \quad (2.3)$$

e, a partir desses vetores, é possível construir uma rede recíproca e obter a primeira *zona de Brillouin* que apresenta geometria hexagonal como mostra a Fig. 7 onde cada vértice

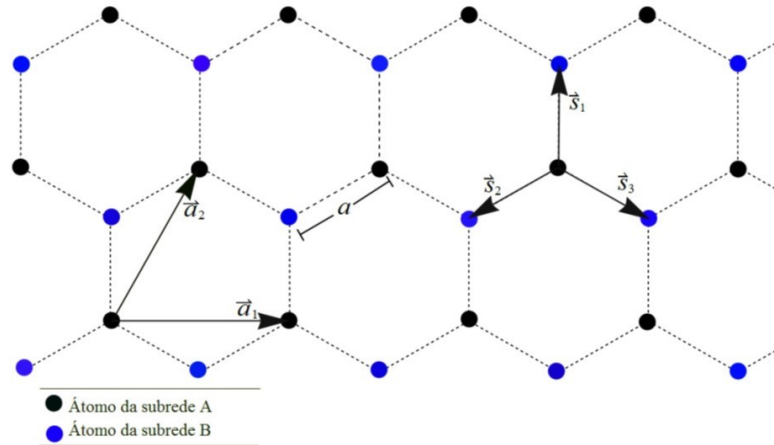


Figura 6 – Estrutura cristalina do grafeno construído como uma superposição de duas sub-redes triangulares A e B , com vetores-base \vec{a}_i para a rede A e vetores \vec{s}_i conectando A com B . (Fonte: Vásquez (2016))

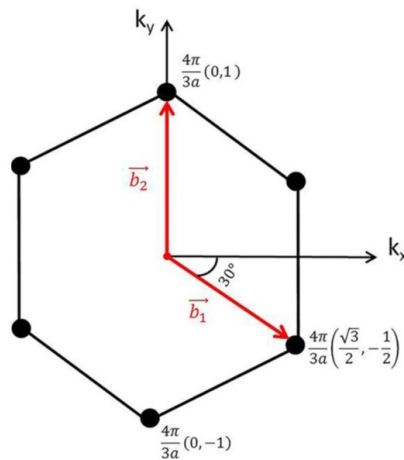


Figura 7 – Rede recíproca do grafeno. (Fonte: Dartora, Jimenez e Zanella (2015))

da primeira zona de Brillouin contém $1/3$ de um átomo de carbono, 3 partes de cada tipo (VÁSQUEZ, 2016).

Por conta da configuração eletrônica do carbono e do seu tipo de hibridização, temos que para cada átomo de carbono há 4 elétrons de valência, onde três desses estão localizados em algum orbital sp^2 e ligam-se a um primeiro vizinho de outro orbital sp^2 , formando assim, as ligações covalentes σ no plano x, y que são altamente direcionais e praticamente inquebráveis. Já o quarto elétron de valência pertence ao orbital p_z , perpendicular ao plano. Se houver ligação entre apenas dois átomos de carbono, a interação entre os orbitais

p_z formam ligações químicas do tipo π , que é um tipo de ligação covalente “mais fraca”, formada por elétrons “livres” cuja consequência no grafeno é a alta condutividade e propriedades ópticas interessantes (DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015; VÁSQUEZ, 2016).

Os orbitais p_z em uma estrutura cristalina do tipo favo de mel, que contém uma grande quantidade de átomos de carbono, arranjam-se de forma que seu diagrama de bandas é composto pelas bandas de valência e de condução π e π^* , respectivamente. Podemos obter toda a formulação física dos elétrons π no grafeno por meio do modelo *tight-binding* simples que considera apenas as interações entre primeiros vizinhos.

O ponto de partida do modelo *tight-binding* é o Hamiltoniano que descreve o salto (*hopping*) de um elétron de um ponto da rede a outro cuja expressão é

$$H_0 = -t \sum_{r \in \Lambda_A} \sum_{i=1,2,3} \left[a^\dagger(\vec{r}) b(\vec{r} + \vec{s}_i) + b^\dagger(\vec{r} + \vec{s}_i) a(\vec{r}) \right] \quad (2.4)$$

onde

a (a^\dagger) é o operador escada fermiônico de aniquilação (criação) dos elétrons da sub-rede A ; b (b^\dagger) é o operador escada fermiônico de aniquilação (criação) dos elétrons da sub-rede B ; $\Lambda_A = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ é a representação dos pontos da rede da subrede A ; t ($\approx 2,8eV$) é a constante de intensidade de salto.

Vamos decompor os operadores escada em termos das componentes de Fourier, segundo a transformação discreta de Fourier na forma

$$a(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a(\vec{k}) \quad (2.5a)$$

$$a^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} a^\dagger(\vec{k}) \quad (2.5b)$$

$$b(\vec{r} + \vec{s}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{s}_j)} b(\vec{k}) \quad (2.5c)$$

$$b^\dagger(\vec{r} + \vec{s}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{s}_j)} b^\dagger(\vec{k}), \quad (2.5d)$$

para diagonalizar o Hamiltoniano (2.4), onde \vec{k} é o vetor de onda no *espaço recíproco* e \vec{r} é o vetor posição do i -ésimo átomo na sub-rede correspondente. E para simplificação escrevemos $\vec{r}_A = \vec{r}$ e $\vec{r}_B = \vec{r}_A + \vec{s}_j = \vec{r} + \vec{s}_j$.

Substituindo as equações (2.5a) a (2.5d) em (2.4) chegamos a

$$H_0 = \sum_{k_x, k_y} -t \left[e^{-iak_y} + 2e^{i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right] a^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) + \quad (2.6)$$

$$+ \sum_{k_x, k_y} -t \left[e^{iak_y} + 2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right] b^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}),$$

que pode ser reescrito na forma

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \left[\phi(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) + \phi^*(\vec{k}) b^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}) \right], \quad (2.7)$$

em que

$$\begin{aligned} \phi(\vec{k}) &= -t \left[e^{-iak_y} + 2e^{i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right], \\ \phi^*(\vec{k}) &= -t \left[e^{iak_y} + 2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right], \end{aligned} \quad (2.8)$$

são definidas no modelo *tight-binding* por meio da interação entre os primeiros vizinhos e os vetores relativos \vec{s}_j definidos em (2.2) (DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015).

Podemos ainda escrever (2.7) na forma matricial, ou seja,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \mathcal{H}(k) \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

em que

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \phi_{\mathbf{k}} \\ \phi_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

onde fizemos uso da notação $f(\vec{k}) = f_{\mathbf{k}}$.

O próximo passo é encontrar a energia do sistema, cujas soluções são dadas pela equação de autovalor da matriz $\mathcal{H}(k)$, ou seja,

$$f(E_k) = \det(\mathcal{H}(k) - E_k I), \quad (2.11)$$

lembrando que E é o autovalor que precisamos encontrar (e a própria energia do sistema) e I a matriz identidade. Desenvolvendo (2.11), sabendo que para encontrar as raízes de $f(E_k)$, o determinante deve ser nulo, chegamos a

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t \left[1 + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) + 4 \cos\left(\frac{3}{2}ak_y\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right]^{1/2}. \quad (2.12)$$

Observamos por (2.12) que existem duas soluções para a energia do sistema de módulo igual e sinais contrários. Fisicamente, essas funções representam as bandas de valência (E_{-k}) e de condução (E_{+k}) no grafeno. Tais bandas de energia se tocam em seis pontos correspondentes aos vértices da primeira zona de Brillouin, como mostra a Fig. 8 isso é justificado porque $\phi(\mathbf{k}) = 0$ e, conseqüentemente $E_+ = E_- = 0$. Além disso, o potencial químico do grafeno $\mu(T = 0) = E_F$, em que E_F é o nível de Fermi cujo valor é nulo nesse material, está situado nesses pontos e é essa física em baixas energias desenvolvida nas proximidades desses pontos que nos interessa.

Pela Fig. 8, observamos que as bandas de energia formam um duplo cone nas proximidades dos pontos em que $\phi(\mathbf{k}) = 0$, porém, apenas 1/3 desses duplos cones estão

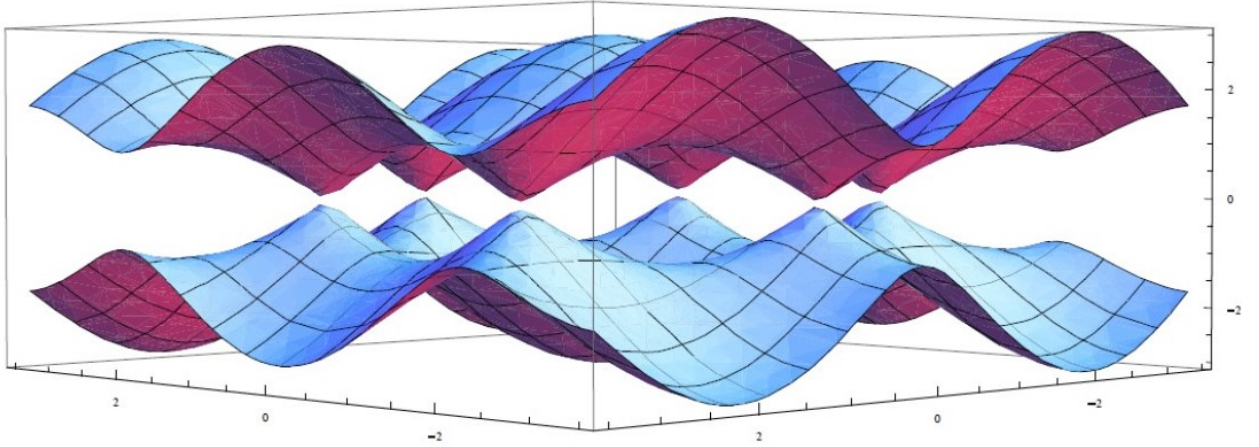


Figura 8 – Estrutura de banda do grafeno a partir do modelo *tight-binding*. (Fonte: [Vásquez \(2016\)](#))

no interior da primeira zona de Brillouin. Sabendo que tal zona possui 6 vértices, temos então apenas dois duplos cones no seu interior, que são inequivalentes e cujos pontos são

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} = \pm \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad (2.13)$$

conhecidos como pontos de Dirac. Em outras palavras, sabendo que cada átomo de carbono do orbital $2p$ cede um elétron para as duas bandas, temos que a banda de valência fica completa e a banda de condução vazia no nível de Fermi, justamente nos pontos de Dirac, e assim, as excitações eletrônicas de baixa energia se encontrarão nas proximidades desses pontos ([DARTORA; JIMENEZ; ZANELLA, 2015](#); [VÁSQUEZ, 2016](#)).

Podemos provar isso ao substituir (2.13) em (2.12):

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t \left[1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right) + 4 \cos \left(\frac{3}{2} a \cdot 0 \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \right]^{1/2},$$

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t \left[1 + 4 \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3} \right) + 4 \cos \left(\frac{2\pi}{3} \right) \right]^{1/2},$$

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t \left[3 + 2 \cos \left(\frac{4\pi}{3} \right) + 4 \cos \left(\frac{2\pi}{3} \right) \right]^{1/2},$$

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t [3 - 1 - 2]^{1/2},$$

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = 0,$$

ou seja, as bandas se cruzam nos pontos de Dirac tendo assim, a mesma energia (degenerescência).

2.3.1 Modelo de Dirac para o grafeno

Próximos aos pontos \mathbf{K}_\pm , as energias das duas bandas são funções lineares de momento $\mathbf{p} \propto (\mathbf{k} - \mathbf{K}_\pm)$, em contraste com o que acontece na formulação de Schrödinger em que a energia é proporcional ao quadrado do momento (SILVA, 2017). Isso pode ser verificado ao expandirmos (2.13) em torno de \mathbf{K}_\pm como segue:

$$E_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}} = \pm |\phi_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}}| = \pm t \left[3 + 2 \cos \left(\frac{4\pi}{3} + \sqrt{3}ap_x \right) + 4 \cos \left(\frac{2\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}ap_x \right) \cos \left(\frac{3}{2}p_y a \right) \right]^{1/2},$$

$$E_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}} = \pm |\phi_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}}| \approx \pm \frac{3}{2}ta \sqrt{p_x^2 + p_y^2} + O(p^2),$$

$$E_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}} = \pm |\phi_{\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}}| \approx \pm \frac{3}{2}tap,$$

ou ainda

$$\phi_{\mathbf{p},+} \approx \frac{3}{2}ta (p_x + ip_y) \equiv +v_f p, \quad (2.14a)$$

$$\phi_{\mathbf{p},-} \approx \frac{3}{2}ta (p_x - ip_y) \equiv -v_f p^*, \quad (2.14b)$$

sendo v_f a velocidade de Fermi dos elétrons nas proximidades dos pontos de Dirac.

Por (2.14a) e (2.14b) observamos que o Hamiltoniano (2.7) muda de forma devido a um grau de liberdade adicional para cada elétron da sub-rede nas duas bandas de energia. Logo, o Hamiltoniano é expresso como

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger K_0 \Psi_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{j=+,-} \left[\phi_{\mathbf{p},j} a_j^\dagger(\mathbf{p}) b_j(\mathbf{p}) + \phi_{\mathbf{p},j}^* b_j^\dagger(\mathbf{p}) a_j(\mathbf{p}) \right], \quad (2.15)$$

onde

$$K_0 = v_f \begin{pmatrix} 0 & p^* & 0 & 0 \\ p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p^* \\ 0 & 0 & -p & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16a)$$

$$\Psi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} b_{\mathbf{p},+} \\ a_{\mathbf{p},+} \\ a_{\mathbf{p},-} \\ b_{\mathbf{p},-} \end{pmatrix}. \quad (2.16b)$$

Assim, a equação (2.15) mostra que a dinâmica dos portadores de carga do grafeno são representadas pelo Hamiltoniano de Dirac reduzido (matriz 4×4) e, por esse motivo, podem ser considerados como partículas relativísticas sem massa. No espaço das coordenadas, o Hamiltoniano (2.15), denominado Hamiltoniano de Dirac, é expresso como

$$\tilde{H}_0 = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) K_0(\vec{r}) \Psi(\vec{r}), \quad (2.17)$$

sendo

$$K_0 = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & 0 & 0 \\ -2i\partial_{\bar{z}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & 0 & 2i\partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.18a)$$

$$\Psi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \psi_+^b(\vec{r}) \\ \psi_+^a(\vec{r}) \\ \psi_-^a(\vec{r}) \\ \psi_-^b(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (2.18b)$$

e $z = x + iy$, $\partial_z = \frac{\partial_x + i\partial_y}{2}$ e $v_f = 1$. Podemos ainda escrever (2.17) na forma compacta:

$$\tilde{H}_0 = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) [-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}] (\vec{r}) \Psi(\vec{r}), \quad (2.19)$$

que descreve as quasipartículas como férmions de Dirac sem massa ⁶ (SILVA, 2017).

2.4 Equação de Dirac no espaço curvo

Vimos na seção anterior que umas das propriedades interessantes do grafeno é que seus elétrons comportam-se como quasipartículas e são descritos por espinores de Dirac. Além disso, ao tentarmos estudar as possíveis consequências das curvaturas encontradas nas amostras, é natural que se use o formalismo da teoria quântica de campos em espaços curvos (VOZMEDIANO; KATSNELSON; GUINEA, 2010). Assim, a equação de Dirac no espaço curvo é expressa como⁷

$$i\gamma^\mu(\mathbf{r}) \nabla_\mu \psi = 0, \quad (2.20)$$

sendo

$$\gamma^\mu = e_{(a)}^\mu \gamma^{(a)}, \quad (2.21)$$

onde as componentes da tétrada $e_{(a)}^\mu$, satisfazem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} e_{\mu}^{(a)}(x) e_{\nu}^a(x) &= \delta_{\nu}^{\mu} \\ e_{\mu}^{(a)}(x) e_{\nu}^b(x) &= \delta_a^b. \end{aligned} \quad (2.22)$$

As matrizes γ devem obedecer à seguinte relação de anticomutação:

$$\{\gamma^\mu(\mathbf{r}), \gamma^\nu(\mathbf{r})\} = 2g^{\mu\nu}(\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

sendo,

$$g_{\mu\nu} = e_{\mu}^{(a)} e_{\nu}^{(b)} \eta_{(a)(b)} \quad (2.24)$$

⁶ Mais detalhes sobre a equação de Dirac no espaço plano, vide apêndice A, seção A.1.

⁷ Verifique que estamos utilizando a equação de Dirac com as matrizes γ (gama).

onde $\eta_{(a)(b)}$ é o tensor de Minkowski que representa a métrica em um espaço-tempo sem curvatura e $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico relacionado a um espaço-tempo de geometria arbitrária. A derivada covariante ∇_μ é definida como

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu. \quad (2.25)$$

sendo Γ_μ , a conexão afim, expressa como

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{8} \omega_{\mu(a)(b)} [\gamma^{(a)}, \gamma^{(b)}]. \quad (2.26)$$

O fator $\omega_{\mu(a)(b)}$ de (2.26), é denominado conexão de spin, e é escrito na forma

$$\omega_{\mu(a)(b)} = e_{(a)l} e_{(b)}^j \Gamma_{j\mu}^l - e_{(b)}^j \partial_\mu e_{(a)l}, \quad (2.27)$$

sendo $\Gamma_{j\mu}^l$ os símbolos de Christoffel:

$$\Gamma_{j\mu}^l = \frac{1}{2} g^{l\lambda} (\partial_j g_{\mu\lambda} + \partial_\mu g_{\lambda j} - \partial_\lambda g_{\mu j}). \quad (2.28)$$

Os termos de conexão afim e de spin podem ser relacionados pelas expressões

$$\Gamma_{\mu\lambda}^\nu = e_a^\nu \partial_\mu e_\lambda^a + e_a^\nu e_\lambda^b \omega_{\mu b}^a \quad (2.29a)$$

$$\omega_{\mu b}^a = e_\nu^a e_a^\lambda \Gamma_{\mu\lambda}^\nu - e_b^\lambda \partial_\mu e_\lambda^a. \quad (2.29b)$$

Para mais detalhes da construção desses objetos, vide seção A.2 do apêndice A. Conhecida a métrica do espaço curvo, existe um procedimento padrão para obter os fatores geométricos que são inseridos na equação de Dirac, como veremos no próximo capítulo.

CAPÍTULO 3

FÉRMIONS SEM MASSA EM UMA FITA DE GRAFENO COM GEOMETRIA HELICOIDAL

No presente capítulo, estudamos o problema de férmions de Dirac sem massa em uma fita de grafeno movendo-se em $(2 + 1)$ dimensões em uma superfície helicoidal. Analisamos o nosso trabalho em dois casos: i) portadores de cargas livres em uma fita de grafeno helicoidal e ii) portadores de carga na presença de um campo magnético uniforme (B) alinhado ao longo do eixo para a mesma geometria. Nosso ponto de partida, em ambos os casos, é a apresentação da equação de Dirac em um espaço-tempo curvo para uma superfície helicoidal, onde chegamos a duas equações do tipo Schrödinger. Logo após, utilizamos e aplicamos os conceitos de função de Green e densidade de estados para calcularmos a densidade local parcial de estados. Devido à geometria escolhida, o sistema, para as duas situações, não possui solução analítica. Desse modo, utilizamos o método de Numerov para encontrarmos soluções do estado de espalhamento para os portadores de carga livre, onde atribuímos diferentes valores em ω (parâmetro de torção) e energias e autofunções para os estados ligados no caso dos férmions submetidos ao campo B . Além disso, calculamos a densidade local de estados (LDOS) a partir das soluções desses estados ligados. Em seguida, analisamos e discutimos as equações de movimento e LDOS para diferentes valores de B e ω . Fixamos os valores de D (largura da fita), L (comprimento da fita) para ambos os casos. Os valores dos parâmetros do sistema foram convenientemente escolhidos para fornecerem resultados mais representativos.

3.1 Caso livre

3.1.1 Equação de Dirac para uma geometria helicoidal

O helicóide (Fig. 9) pode ser parametrizado no \mathbb{R}^3 como

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ u \cos(\omega v) \\ u \sin(\omega v) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

onde

- v corresponde à coordenada cíclica, em que $v \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]$, sendo L o comprimento total da fita alinhado ao eixo x , dado em nanômetro (nm);
- u é o raio do helicóide, em que $u \in \left[-\frac{D}{2}, \frac{D}{2}\right]$, onde D é a largura da fita dado em nanômetro (nm);
- $\omega = \frac{2\pi m}{L}$ é um número real que determina a quiralidade da superfície, ou seja, é o parâmetro de torção, cuja unidade é dada em rad/nm , e m equivale ao número de torções angulares de 2π .

Ressaltamos que a palavra torção, refere-se à deformação devido a uma rotação. É uma tradução livre do termo em inglês *twist*, que é largamente utilizada em trabalhos nacionais. Como exemplo, citamos os trabalhos de [Verçosa \(2012\)](#), [Souza \(2014\)](#) e [Penha \(2021\)](#). Desse modo, seguiremos com esse sentido até o final do presente trabalho.

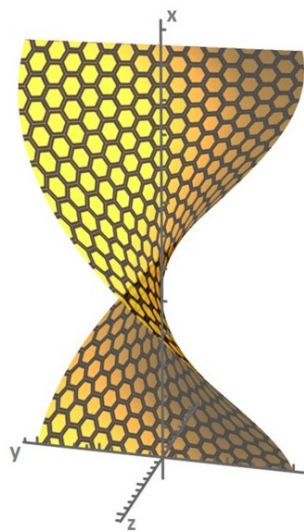


Figura 9 – Helicóide no espaço euclidiano tridimensional.

Os elementos de comprimento do helicóide, por (3.1), são

$$\begin{aligned} dx &= dv \\ dy &= \cos(\omega v) du - \omega u \sin(\omega v) dv \\ dz &= \omega u \cos(\omega v) dv + \sin(\omega v) du. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Devido a esta parametrização, o helicóide pode ser mapeado em $(2 + 1)$ dimensões no espaço-tempo. Sabendo que o elemento de linha no espaço plano é escrito na forma

$$ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2, \quad (3.3)$$

substituímos (3.2) em (3.3) e obtemos o elemento de linha para o helicóide:

$$ds^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -(1 + u^2\omega^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dt^2 \\ du^2 \\ dv^2 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Desse modo, a métrica para o helicóide pode ser escrita na forma

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -(1 + u^2\omega^2) \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{(1+u^2\omega^2)} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

e sabendo que,

$$g_{\mu\nu} = e_{\mu}^{(a)} e_{\nu}^{(b)} \eta_{(a)(b)}, \quad (3.7)$$

onde $\eta_{(a)(b)} = \text{diag}(+ - -)$ (métrica de Minkowski), as tétradas¹ podem ser escolhidas como

$$e_{\mu}^{(a)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{1 + u^2\omega^2} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$e_{\mu(a)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{1 + u^2\omega^2} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

$$e_{(a)}^{\mu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

¹ Para mais detalhes sobre o formalismo das tétradas, vide apêndice A, subseção A.2.2.

Ressaltando que os índices latinos entre parêntesis referem-se ao espaço plano e os índices gregos a um espaço curvo.

Agora vamos calcular os símbolos de Christoffel $\Gamma_{j\mu}^l$ lembrando que, (2.28),

$$\Gamma_{j\mu}^l = \frac{1}{2}g^{l\lambda} (\partial_j g_{\mu\lambda} + \partial_\mu g_{\lambda j} - \partial_\lambda g_{\mu j}), \quad (3.11)$$

desse modo, temos

$$\Gamma_{vv}^u = -u\omega^2, \quad (3.12)$$

$$\Gamma_{uv}^v = \frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2}, \quad (3.13)$$

$$\Gamma_{vu}^v = \frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2}. \quad (3.14)$$

O próximo passo é calcular a conexão de spin $\omega_{\mu(a)(b)}$, (2.27), onde

$$\omega_{\mu(a)(b)} = e_{(a)l}e_{(b)}^j \Gamma_{j\mu}^l - e_{(b)}^j \partial_\mu e_{(a)l}, \quad (3.15)$$

logo

$$\omega_{vuv} = \frac{u\omega^2}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}. \quad (3.16)$$

E assim, podemos calcular os termos de conexão afim Γ_μ , (2.26),² definidos como

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{8}\omega_{\mu(a)(b)} [\gamma^{(a)}, \gamma^{(b)}], \quad (3.17)$$

da seguinte forma

$$\Gamma_v = \frac{1}{4} \frac{u\omega^2}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} [\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}]. \quad (3.18)$$

Desse modo, usamos a equação de Dirac sem massa no espaço curvo

$$i\gamma^\mu \nabla_\mu \Psi(u, v, t) = 0, \quad (3.19)$$

onde $\nabla_\mu = \partial_\mu - \Gamma_\mu$, como visto na Sec. 2.4, Eq. (2.25), e $\gamma^\mu = e_{(a)}^\mu \gamma^{(a)}$. Como estamos tratando de uma partícula livre sem massa e que não possui dependência temporal, a função de onda de Ψ , pode ser escrita na forma

$$\Psi(u, v, t) = e^{-iEt} \psi(u, v), \quad (3.20)$$

onde E é a energia do férmion. Assim, substituindo (3.20) em (3.19), chegamos em uma equação independente do tempo, como podemos verificar a seguir:

$$(i\gamma^{(0)}e_0^{(0)}\partial_0 + i\gamma^{(1)}e_u^{(u)}\partial_u + i\gamma^{(2)}e_v^{(v)}(\partial_v - \Gamma_v)) \Psi(u, v, t) = 0,$$

$$\left(i\gamma^{(0)}\partial_t + i\gamma^{(1)}\partial_u + i\gamma^{(2)} \frac{1}{1+u^2\omega^2} \left(\partial_v - \frac{1}{4} \frac{u\omega^2}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} [\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}] \right) \right) e^{-iEt} \psi(u, v) = 0,$$

² Vide subsubseção A.2.2.1 do apêndice A para mais detalhes sobre as conexões de spin e afim.

$$\left(i\gamma^{(1)}\partial_u + i\gamma^{(2)}\frac{1}{1+u^2\omega^2} \left(\partial_v - \frac{1}{4}\frac{u\omega^2}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} [\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}] \right) \right) \psi(u, v) = -\gamma^{(0)}E\psi(u, v). \quad (3.21)$$

Em se tratando de uma equação de Dirac, sabemos que $\psi(u, v)$ é o espinor de Dirac expresso na forma

$$\psi(u, v) = \begin{pmatrix} \psi^+(u, v) \\ \psi^-(u, v) \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

em que $\psi^+(u, v)$ e $\psi^-(u, v)$ são as componentes superior e inferior, respectivamente. Escolhemos a representação

$$\begin{aligned} \gamma^{(0)} &= \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ \gamma^{(1)} &= i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma^{(2)} &= -i\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

chegamos a um sistema de duas equações diferenciais acopladas de primeira ordem ψ^\pm :

$$\left(i\partial_u + \frac{i}{2}\frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2} + \frac{1}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}\partial_v \right) \psi^-(u, v) = -E\psi^+(u, v), \quad (3.24a)$$

$$\left(i\partial_u + \frac{i}{2}\frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2} - \frac{1}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}\partial_v \right) \psi^+(u, v) = -E\psi^-(u, v), \quad (3.24b)$$

onde v é uma coordenada cíclica em que podemos considerar ωv como o ângulo azimutal e $L_v = -\frac{i}{\omega}\frac{\partial}{\partial v}$ o operador angular em torno do eixo do helicóide (simetria cilíndrica) que satisfaz

$$L_v\psi(u, v) = l\psi(u, v), \quad (3.25)$$

sendo $l \in \mathbb{Z}$. Além disso, L_v comuta com o Hamiltoniano

$$\hat{H} = \gamma^{(0)}\gamma^i\hat{p}_i. \quad (3.26)$$

Isso significa que ambos têm autofunções simultâneas. É importante mencionar que o valor de l determina a direção que os portadores de carga tomam ao longo do eixo, ou seja, se $l > 0$ os portadores de carga sobem e se $l < 0$, eles descem. Utilizando o seguinte *ansatz*,

$$\psi^\pm(u, v) = \frac{e^{i\omega lv}}{(1+u^2\omega^2)^{1/4}}\phi^\pm(u), \quad (3.27)$$

as equações (3.24a) e (3.24b) podem ser reduzidas a

$$i \left(\partial_u + \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \right) \phi^-(u) = -E\phi^+(u), \quad (3.28a)$$

$$i \left(\partial_u - \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \right) \phi^+(u) = -E\phi^-(u). \quad (3.28b)$$

Sendo $E \neq 0$, podemos desacoplar (3.28a) e (3.28b) reescrevendo (3.28b) na forma

$$\phi^-(u) = -\frac{i}{E} \left(\partial_u - \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \right) \phi^+(u) \quad (3.29)$$

e substituindo em (3.28a), onde obtemos

$$\partial_u^2 \phi^+(u) - \left[\left(\frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \right)^2 + \partial_u \left(\frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} \right) \right] \phi^+(u) = -E^2 \phi^+(u). \quad (3.30)$$

Podemos reduzir ainda mais (3.30) escrevendo

$$W(u) = \frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}, \quad (3.31)$$

onde $W(u)$ é uma função tipo superpotencial. A presença desse superpotencial é o indicativo que o sistema possui uma supersimetria e que as técnicas da mecânica quântica supersimétrica poderiam ser utilizadas satisfatoriamente³. Substituindo (3.31) em (3.30) temos

$$-\frac{d^2}{du^2} \phi^+(u) + \left(W^2(u) + \frac{d}{du} W(u) \right) \phi^+(u) = E^2 \phi^+(u) \quad (3.32)$$

e para $\phi^-(u)$:

$$-\frac{d^2}{du^2} \phi^-(u) + \left(W^2(u) - \frac{d}{du} W(u) \right) \phi^-(u) = E^2 \phi^-(u). \quad (3.33)$$

Notemos que as equações (3.32) e (3.33) estão expressas na forma de uma equação diferencial do tipo Schrödinger, cujo potencial efetivo é expresso na forma

$$V^\pm(u) = W^2(u) \pm \frac{d}{du} W(u). \quad (3.34)$$

Desse modo, temos

$$-\frac{d^2}{du^2} \phi^\pm(u) + V^\pm(u) \phi^\pm(u) = E^2 \phi^\pm(u). \quad (3.35)$$

Observamos que as equações para $\phi^\pm(u)$ são dependentes de E . Isso significa que devemos buscar soluções de estados ligados para os dois sinais em (3.35) para uma energia comum.

Na Fig. 10, mostramos os perfis dos potenciais efetivos para alguns valores de ω com $D = 12 \text{ nm}$ e $L = 10\pi \text{ nm}$. Observamos que nos dois casos os perfis dos potenciais efetivos são compostos por um potencial de barreira tendendo a zero quando $u \rightarrow \pm\infty$ ⁴, o que implica na existência apenas de estado de espalhamento. Podemos verificar, a

³ Para mais detalhes sobre a mecânica quântica supersimétrica, vide Sukumar (1985), Cooper, Ginocchio e Khare (1987), Aleixo, Balantekin e Ribeiro (2000), Soares (2017).

⁴ Esse intervalo é comentado no ponto de vista matemático. Para nosso caso, basta que o potencial seja nulo nas bordas da fita, ou seja $\pm 10\pi \text{ nm}$.

partir de (3.34) que os potenciais efetivos satisfazem a relação $V_l^+(u) = V_l^-(-u)$. Isso significa que a mudança de quiralidade $\omega \rightarrow -\omega$ troca os potenciais efetivos, o que faz com que os potenciais sejam simetricamente opostos quando comparados um com o outro. Logo, $V_l^+(u)$ pode ser transformado em $V_l^-(-u)$ e vice-versa. Usando a definição (3.31) e a forma do potencial efetivo (3.34), podemos mostrar que o valor máximo dos potenciais efetivos são $V_l^\pm = 1.19\omega^2$, ou seja, o pico da barreira aumenta à medida que ω aumenta. É importante destacar que ω também está relacionado à torção em torno do eixo do helicoides (parâmetro de torção), a saber, $\omega = 2\pi m/L$, onde m é o número de voltas 2π . Em nosso caso, $\omega = 1.5 \text{ rad/nm}$ e $\omega = 3.0 \text{ rad/nm}$ são equivalentes a 7.5 e 15 torções, respectivamente. Esse comportamento vai afetar diretamente a concentração dos estados no eixo do helicoides como será visto na próxima seção.

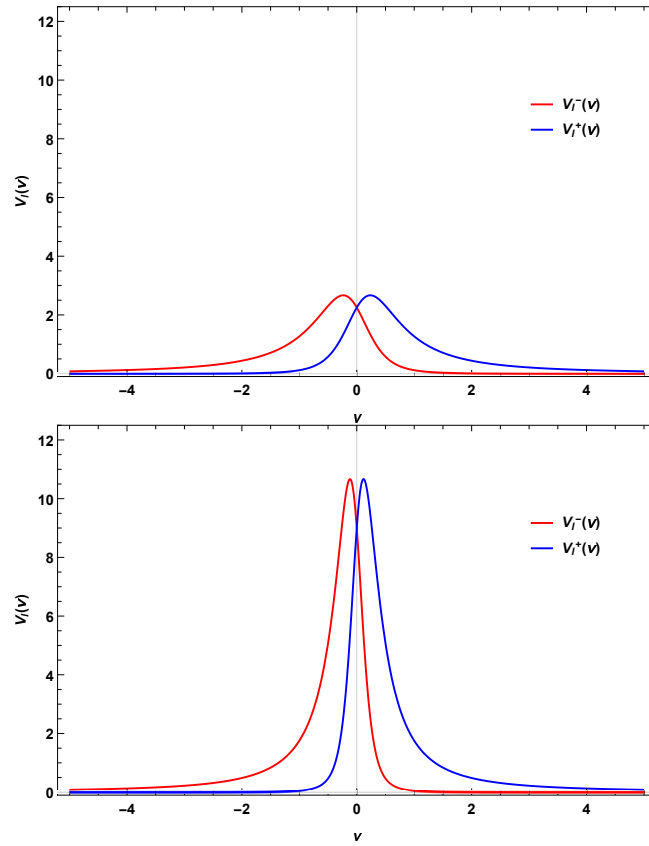


Figura 10 – Potenciais efetivos da fita helicoidal para $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$ (painel superior) e $\omega = 3.0 \text{ rad/nm}$ (painel inferior).

3.1.2 Densidade de estados

Ao lidar com espectros contínuos dos elétrons livres na rede do grafeno, precisamos de uma grandeza que nos permita visualizar suas funções de onda. Tal grandeza é a densidade de estados definida como o número de estados eletrônicos por unidade de área

e de energia cujo cálculo é realizado por meio da função de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$. Antes de tratarmos da densidade de estados, falaremos brevemente das funções de Green.

3.1.2.1 Funções de Green

Para resolvermos equações diferenciais não homogêneas submetidas a condições iniciais ou de contorno, utilizamos de uma poderosa ferramenta com vasta aplicabilidade na Física: as funções de Green. No presente trabalho, utilizaremos o método das funções de Green para o cálculo da densidade local de estados (do inglês *local density of states*, conhecido pela sigla LDOS).

Como ponto de partida, vamos definir a função de Green ordenada no tempo para uma única partícula, na forma

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i \langle T [\Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t')] \rangle, \quad (3.36)$$

onde $T [\Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t')]$ é o produto ordenado no tempo, para dois campos fermiônicos Ψ e $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^{(0)}$, definido como

$$T [\Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t')] = \theta(t - t') \Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t') - \theta(t' - t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t') \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.37)$$

e $\theta(t - t')$ e $\theta(t' - t)$ são as funções de Heaviside⁵.

Sabendo que

$$\frac{d}{dt} \theta(t - t') = \delta(t - t') \quad (3.38a)$$

$$\frac{d}{dt} \theta(t' - t) = -\delta(t - t'), \quad (3.38b)$$

e utilizando (3.36) e (3.37), podemos derivar a equação de movimento para a função de Green $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$. Desse modo, a derivada temporal da função de Green torna-se

$$i \frac{d}{dt} G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \langle \{ \Psi(\vec{r}, t), \bar{\Psi}(\vec{r}', t') \} \rangle + \left\langle T \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}', t') \right] \right\rangle. \quad (3.39)$$

O próximo passo é considerar um Hamiltoniano \hat{H} , onde

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.40)$$

5

A função degrau de Heaviside, ou função de degrau unitário, que geralmente é notada pelos símbolos H ou u , é uma função descontínua de valor único, cujo valor é zero para argumento negativo e um para argumento positivo. Esta função foi introduzida por Oliver Heaviside, que foi um importante pioneiro no estudo da eletrônica e também deu uma contribuição notável ao campo do Cálculo Operacional (VENETIS, 2014).

Substituindo (3.40) em (3.39) chegamos a

$$\gamma^{(0)} \left[i \frac{d}{dt} - \hat{H} \right] G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.41)$$

onde se observa que a função de Green obedece uma equação diferencial de primeira ordem não homogênea. Considerando um sistema em equilíbrio e independente do tempo, temos uma dependência da função de Green na diferença temporal $t - t'$. Assim, podemos utilizar o espaço de Fourier para representar $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ no seguinte modo:

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{2\pi} \int dw G(\vec{r}, \vec{r}'; w) e^{-iw(t-t')}. \quad (3.42)$$

Sendo a integral da função delta de Dirac

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int dw e^{-iw(t-t')}, \quad (3.43)$$

podemos reescrever (3.41) como

$$\gamma^{(0)} [w - \hat{H}] G(\vec{r}, \vec{r}'; w) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.44)$$

Podemos escrever (3.41) na forma

$$\gamma^{(0)} [w - \hat{H}] G(w) = \mathbb{I}, \quad (3.45)$$

onde $G(w)$ é a função de Green no espaço das frequências, da qual a relação com a função de Green no espaço real ocorre por meio da expressão

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; w) = \langle \vec{r} | G(w) | \vec{r}' \rangle, \quad (3.46)$$

cujas solução é

$$G(w) = \gamma^{(0)} [w - \hat{H}]^{-1}, \quad (3.47)$$

que está definida para todos os valores de energia, exceto para as autoenergias do Hamiltoniano H . Logo, precisamos definir a função de Green como o limite

$$G^\pm(w) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\gamma^{(0)}}{w \pm i\eta - H}. \quad (3.48)$$

Observamos em (3.48) que a parte imaginária, define duas condições de contorno necessárias para que (3.47) seja definida de forma única. Tais condições são conhecidas como *função de Green retardada* ($G^r(w)$) e *função de Green avançada* ($G^a(w)$), que são definidas como

$$G^r(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle \{ \Psi(\vec{r}, t), \bar{\Psi}(\vec{r}', t') \} \rangle, \quad (3.49a)$$

$$G^a(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = +i\theta(t - t') \langle \{ \Psi(\vec{r}, t), \bar{\Psi}(\vec{r}', t') \} \rangle. \quad (3.49b)$$

As funções G^r e G^a obedecem a seguinte relação

$$G^r(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = [G^a(\vec{r}, t; \vec{r}', t')]^*. \quad (3.50)$$

De forma análoga ao que foi feito para $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$, podemos obter as equações de movimento para $G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$, ou seja

$$\gamma^{(0)} \left[i \frac{d}{dt} - \hat{H} \pm i0^+ \right] G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.51)$$

e, usando o espaço de Fourier

$$G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (3.52)$$

Substituindo (3.43) e (3.52) em (3.51) e aplicando o limite $\eta \rightarrow 0$, chegamos a

$$\gamma^{(0)} [w - \hat{H} \pm i0^+] G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; w) e^{-i\omega(t-t')} = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.53)$$

A partir de (3.53), podemos concluir que, se o Hamiltoniano \hat{H} admite um conjunto completo de autofunções $\{\Psi_k\}$, onde k denota o conjunto de números quânticos necessários para descrever o sistema, é possível construir uma função de Green a partir dessas autofunções e respectivos autovalores de energia. Tal conjunto completo satisfaz a seguinte relação de completudeza:

$$\{\Psi_k(\vec{r}, t), \bar{\Psi}_k(\vec{r}', t')\} |_{t=t'} = \gamma^{(0)} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.54)$$

Desse modo, podemos impor a seguinte relação

$$G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; w) = \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \frac{\Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r}')}{w - |\varepsilon_k| \pm i0^+}, \quad (3.55)$$

onde o somatório percorre todo o conjunto completo de estados (discreto e contínuo), Ψ_k com energia ε_k . Além disso, o sinal vincula energia positivas e negativas, tendo em vista que nos interessa o módulo da energia no somatório. Em termos quânticos, a função de Green $G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; w)$ pode estar relacionada com a densidade local de estados $\rho(\vec{r}, w)$.

3.1.2.2 Construção da densidade local de estados

Como falamos no início desta seção, a densidade de estados é uma grandeza que nos permite visualizar as funções de onda de espectros contínuos de um dado sistema. Por isso, é tão útil para analisar propriedades eletrônicas em sólidos. Sabendo que esta grandeza representa o número de autoestados de um sistema por unidade de energia, temos a seguinte expressão para a densidade *local* de estados

$$\rho(\vec{r}, w) = \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r}) \delta(w - |\varepsilon_k|) \quad (3.56)$$

Agora vamos escrever a densidade local de estados em termos das funções de Green. Para isso, utilizamos a seguinte identidade:

$$\frac{1}{x - a \pm i0^+} = P\left(\frac{1}{x - a}\right) \mp i\pi\delta(x - a) \quad (3.57)$$

sendo $P\left(\frac{1}{x}\right)$ o valor principal da integral de Cauchy, reescrevemos (3.56) como

$$\rho(\vec{r}; w) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k, \text{sgn}(\epsilon_k)} \frac{\Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r})}{w - |\epsilon_k| \pm i0^+} \quad (3.58)$$

onde o produto $\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r})$ pode ser expresso na forma

$$\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r}) = \text{tr} \left[\gamma^{(0)} \Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r}) \right]. \quad (3.59)$$

Por (3.59), podemos reescrever (3.58) na forma

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}; w) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k, \text{sgn}(\epsilon_k)} \text{tr} \left[\gamma^{(0)} \frac{\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r})}{w - |\epsilon_k| \pm i0^+} \right], \\ \rho(\vec{r}; w) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k, \text{sgn}(\epsilon_k)} \text{tr} \left[\gamma^{(0)} G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}; w) \right]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

o que demonstra uma estreita ligação entre as funções de Green $G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}; w)$ e a LDOS no espaço real. Desta forma, a partir do cálculo de funções de Green locais, podemos obter explicitamente a densidade local de estados eletrônicos em uma dada energia.

A seguir, obtemos as soluções de estados de espalhamento e densidade de estados de forma numérica para o nosso sistema, usando o método de Numerov⁶.

3.1.2.3 Densidade local parcial de estados para uma partícula livre

Utilizando a função de Green para o helicóide, podemos decompor a densidade local de estados em uma densidade parcial expressa como

$$\rho(u) = \frac{1}{2} \sum_l \left[|\Psi_l^+(u)|^2 + |\Psi_l^-(u)|^2 \right]. \quad (3.61)$$

Seja um l particular, queremos obter a informação de como os estados estão distribuídos. Nesse caso, calculamos a densidade local de estados parcial (PLDOS, dos inglês *partial local density of states*) $\rho_l(u)$. Fixando os valores $l = 1$ e $E = \sqrt{2,5} eV$, podemos observar

6

Método de Numerov é um método numérico para resolver uma equação diferencial ordinária de segunda ordem cujo termo de derivada de primeira ordem não aparece. Este método é implícito, mas se torna explícito quando a equação diferencial é linear (métodos explícitos e implícitos). (HAIRER; NØRSETT; WANNER, 1993)

Para mais detalhes, vide apêndice B

como a densidade local parcial de estados (PLDOS) se comporta para o parâmetro de torção ω com dois valores diferentes. Isso é ilustrado na Fig. 11, onde $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$ no painel à esquerda e $\omega = 2,0 \text{ rad/nm}$ no painel à direita, equivalentes a 7,5 e 10 torções, respectivamente.

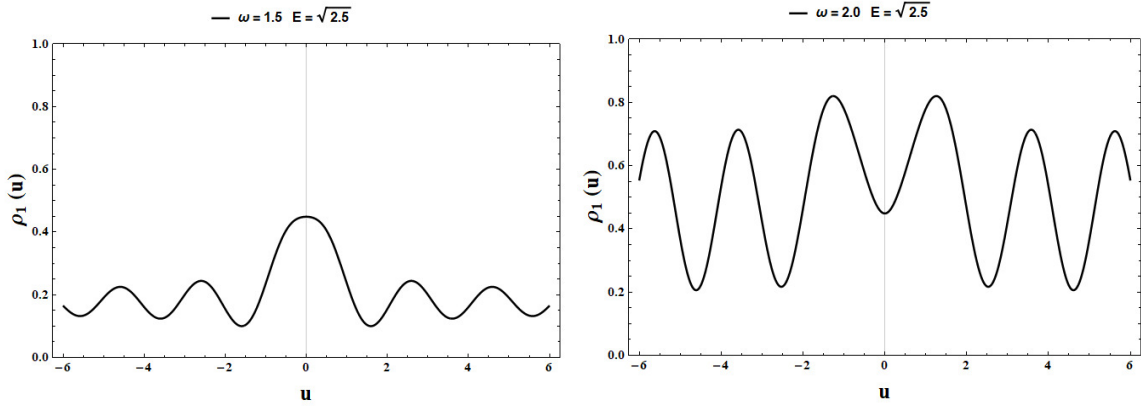


Figura 11 – PLDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$ (painel à esquerda) e $\omega = 2,0 \text{ rad/nm}$ (painel à direita), sendo $l = 1$, $E = \sqrt{2,5} \text{ eV}$.

A partir da Fig. 11, podemos observar que quando a fita é torcida mais vezes (grandes valores de ω), os estados tendem a se deslocar para regiões distantes do eixo do helicóide. Esse comportamento ocorre devido ao aumento da intensidade da barreira (potencial mais repulsivo), que mantém seu pico próximo ao eixo do helicóide. Nossos resultados estão de acordo com os resultados obtidos por [Watanabe et al. \(2015\)](#), onde o mesmo caso é analisado, porém, com parametrização diferente. Desse modo, de posse da análise inicial, estamos aptos a incluir campos externos e observar (estudar) como eles influenciam no comportamento da LDOS, que será discutido na próxima seção.

3.2 Férmions sem massa em uma fita de grafeno com geometria helicoidal na presença de um campo magnético

3.2.1 Fita helicoidal na presença de um campo magnético uniforme

3.2.1.1 Formalismo

Vimos na seção anterior, 3.1 o formalismo de Dirac para um grafeno com geometria helicoidal cuja parametrização é mostrada em (3.1), ou seja

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ u \cos(\omega v) \\ u \sin(\omega v) \end{pmatrix}, \quad (3.62)$$

Desse modo, o vetor posição \vec{r} é

$$\vec{r} = v\hat{i} + u \cos(\omega v)\hat{j} + u \sin(\omega v)\hat{k}. \quad (3.63)$$

Realizando o processo padrão de mudança de base, escrevemos as bases \hat{e}_u e \hat{e}_v na parametrização (u, v) , utilizando a expressão

$$\hat{e}_u = \frac{\partial_u \vec{r}(u, v)}{|\partial_u \vec{r}(u, v)|}, \quad (3.64)$$

onde chegamos a

$$\hat{e}_u = \cos(\omega v)\hat{j} + \sin(\omega v)\hat{k} \quad \text{e} \quad (3.65a)$$

$$\hat{e}_v = \frac{\hat{i} - \omega u \sin(\omega v)\hat{j} + \omega u \cos(\omega v)\hat{k}}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}}. \quad (3.65b)$$

Sendo

$$\partial_u \vec{r}(u, v) = \cos(\omega v)\hat{j} + \sin(\omega v)\hat{k}. \quad (3.66a)$$

$$\partial_v \vec{r}(u, v) = \hat{i} - \omega u \sin(\omega v)\hat{j} + \omega u \cos(\omega v)\hat{k}, \quad (3.66b)$$

podemos fazer o processo inverso, ou seja, escrever as derivadas parciais cartesianas $(\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ em função das derivadas parciais ∂_u, ∂_v . Desse modo, temos

$$\partial_x = \frac{\partial}{\partial v} \quad (3.67a)$$

$$\partial_y = \cos(\omega v)\frac{\partial}{\partial u} - \frac{\sin(\omega v)}{\omega u}\frac{\partial}{\partial v} \quad (3.67b)$$

$$\partial_z = \sin(\omega v)\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\cos(\omega v)}{\omega u}\frac{\partial}{\partial v}. \quad (3.67c)$$

Desenvolvemos as derivadas parciais acima para escrevermos o campo magnético na geometria helicoidal. Vale ressaltar que nosso objetivo é analisar o comportamento dos férmions sem massa sob a influência deste campo externo. Logo, é necessário escrevermos o quadripotencial eletromagnético A^α em termos das coordenadas da parametrização do helicóide. Desse modo, utilizando as bases \hat{e}_u e \hat{e}_v , encontramos a parte espacial do quadripotencial eletromagnético $A^\alpha = (A_0, \vec{A})$, ou seja:

$$\vec{A} = A_u \hat{e}_u + A_v \hat{e}_v$$

$$\vec{A} = A_u (\cos(\omega v)\hat{j} + \sin(\omega v)\hat{k}) + A_v \left(\frac{\hat{i} - \omega u \sin(\omega v)\hat{j} + \omega u \cos(\omega v)\hat{k}}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \right)$$

$$\vec{A} = \left(\frac{A_v}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \right) \hat{i} + \left(A_u \cos(\omega v) - A_v \frac{\omega u \sin(\omega v)}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \right) \hat{j} + \left(A_u \sin(\omega v) + A_v \frac{\omega u \cos(\omega v)}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \right) \hat{k}. \quad (3.68)$$

Podemos observar claramente a relação entre as componentes de \vec{A} na base cartesiana e as componentes de \vec{A} na base helicoidal, isto é:

$$A_x = \frac{A_v}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \quad (3.69a)$$

$$A_y = A_u \cos(\omega v) - A_v \frac{\omega u \sin(\omega v)}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \quad (3.69b)$$

$$A_z = A_u \sin(\omega v) + A_v \frac{\omega u \cos(\omega v)}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}}. \quad (3.69c)$$

3.2.1.2 Campo magnético paralelo ao eixo da fita helicoidal

De posse das expressões (3.67b), (3.67c), (3.69b) e (3.69c), calculamos o campo magnético paralelo ao eixo da fita helicoidal, Fig. 12, ou seja, na direção \hat{i} , isto é, $\vec{B} = B\hat{i}$ cuja definição é

$$B = \partial_y A_z - \partial_z A_y. \quad (3.70)$$

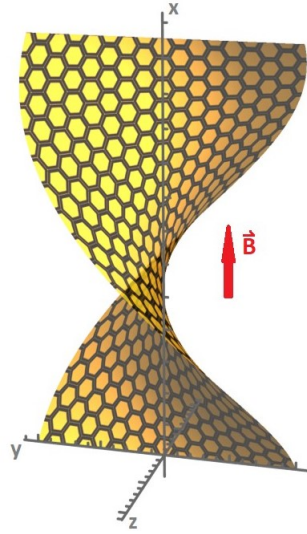


Figura 12 – Helicóide no espaço euclidiano tridimensional.

Vale ressaltar que não é possível obter um campo magnético uniforme perpendicular ao eixo do helicóide, o que nos levou a estudar apenas o campo paralelo. Com as devidas substituições, obtemos

$$B = \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\omega u A_v}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} \right) + \frac{\omega A_v}{\sqrt{1 + u^2\omega^2}} - \frac{1}{\omega u} \frac{\partial}{\partial v} A_u. \quad (3.71)$$

Com a finalidade de obtermos um campo magnético uniforme ($B = cte$), escolhemos adequadamente $A_v = A_v(u)$ e $A_u = 0$ e obtemos

$$A_v = \frac{B}{2\omega} \sqrt{1 + u^2\omega^2}. \quad (3.72)$$

Para estudarmos os efeitos do campo magnético externo proposto em (3.72), realizamos o acoplamento mínimo tradicional

$$\partial_u \rightarrow \partial_u + ieA_u. \quad (3.73)$$

Assim, com (3.73) reescrevemos (3.19) e obtemos a equação de Dirac no espaço curvo com acoplamento mínimo na forma

$$\left(i\gamma^{(1)}\nabla_u - \gamma^{(2)}A_v \right) \Psi(u, v, t) = 0. \quad (3.74)$$

Sabendo que a interação é independente do tempo, utilizamos (3.20), (3.22), as representações (3.23) e, de forma análoga as equações (3.24a) e (3.24b), chegamos às equações de primeira ordem com acoplamento mínimo:

$$\left(i\partial_u + \frac{i}{2} \frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2} + \frac{1}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}\partial_v - ieA_v \right) \psi^-(u, v) = -E\psi^+(u, v) \quad (3.75a)$$

$$\left(i\partial_u + \frac{i}{2} \frac{u\omega^2}{1+u^2\omega^2} - \frac{1}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}\partial_v + ieA_v \right) \psi^+(u, v) = -E\psi^-(u, v). \quad (3.75b)$$

De forma análoga à seção anterior, utilizamos o seguinte ansatz

$$\psi^\pm(u, v) = \frac{e^{i\omega l v}}{(1+u^2\omega^2)^{1/4}} \phi^\pm(u) \quad (3.76)$$

e substituindo em (3.75a) e (3.75b) obtemos

$$i \left(\partial_u + \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - ieA_v \right) \phi^-(u) = -E\phi^+(u) \quad (3.77a)$$

$$i \left(\partial_u - \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} + ieA_v \right) \phi^+(u) = -E\phi^-(u). \quad (3.77b)$$

Sendo $E \neq 0$, podemos desacoplar (3.77a) e (3.77b) reescrevendo (3.77b) na forma

$$\phi^-(u) = -\frac{i}{E} \left(\partial_u - \frac{\omega l}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} + ieA_v \right) \phi^+(u) \quad (3.78)$$

e substituindo em (3.77a), temos

$$\partial_u^2 \phi^+(u) - \left[\left(\frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - eA_v \right)^2 + \partial_u \left(\frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - eA_v \right) \right] \phi^+(u) = -E^2 \phi^+(u). \quad (3.79)$$

Escrevendo o superpotencial na forma

$$W(u) = \frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - eA_v, \quad (3.80)$$

temos

$$-\frac{d^2}{du^2} \phi^+(u) + \left(W^2(u) + \frac{d}{du} W(u) \right) \phi^+(u) = E^2 \phi^+(u) \quad (3.81)$$

e, para $\phi^-(u)$:

$$-\frac{d^2}{du^2}\phi^-(u) + \left(W^2(u) - \frac{d}{du}W(u)\right)\phi^-(u) = E^2\phi^-(u). \quad (3.82)$$

Semelhantemente ao que vimos na seção 3.1, podemos verificar que as equações (3.81) e (3.82) são equações diferenciais de segunda ordem do tipo Schrödinger, cujo potencial efetivo é expresso na forma

$$V^\pm(u) = W^2(u) \pm \frac{d}{du}W(u). \quad (3.83)$$

Desse modo, temos

$$-\frac{d^2}{du^2}\phi^\pm(u) + V^\pm(u)\phi^\pm(u) = E^2\phi^\pm(u). \quad (3.84)$$

Observamos que as equações para $\phi^\pm(u)$ são dependentes de E . Isso significa que devemos buscar soluções de estado limite para os dois sinais em (3.84) com uma energia comum.

Retomando a expressão (3.72) e substituindo em (3.80) chegamos a

$$W(u) = \frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - \frac{eB}{2\omega}\sqrt{1+u^2\omega^2}. \quad (3.85)$$

Substituindo (3.85) em (3.83) temos

$$V^\pm(u) = \left(\frac{l\omega}{\sqrt{1+u^2\omega^2}} - \frac{eB}{2\omega}\sqrt{1+u^2\omega^2}\right)^2 \mp \left(\frac{\omega u^3 l}{\sqrt{(1+u^2\omega^2)^3}} + \frac{\omega u e B}{\sqrt{1+u^2\omega^2}}\right). \quad (3.86)$$

Podemos verificar, a partir de (3.86) que os potenciais efetivos satisfazem a relação $V_l^+(u) = V_l^-(-u)$. Isso significa que a mudança de quiralidade $\omega \rightarrow -\omega$ troca os potenciais efetivos, o que faz com que os potenciais sejam simetricamente opostos quando comparados um com o outro. Logo, $V_l^+(u)$ pode ser transformado em $V_l^-(-u)$ e vice-versa. O comportamento desses potenciais é traçado na Fig. 13 para $l = 1$, $B = 0,8 T$ e $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$, onde convenientemente fixamos $D = 12 \text{ nm}$ e $L = 10\pi \text{ nm}$.

Também observamos pela Fig. 13 que os potenciais efetivos V_l^\pm são formados por dois poços de potenciais de diferentes profundidades separados por uma barreira de potencial, cujo máximo se encontra próximo a $u = 0$. Para que haja soluções de estado ligado, é necessária a estrutura de poço e isso ocorre devido à presença do campo magnético uniforme. Entretanto, as equações supersimétricas do tipo Schrödinger (3.84) com os potenciais efetivos (3.86) não possuem soluções exatas devido à geometria escolhida. Desso modo, obtemos as soluções de estado ligado e densidade local de estados de forma numérica, como será demonstrado a seguir.

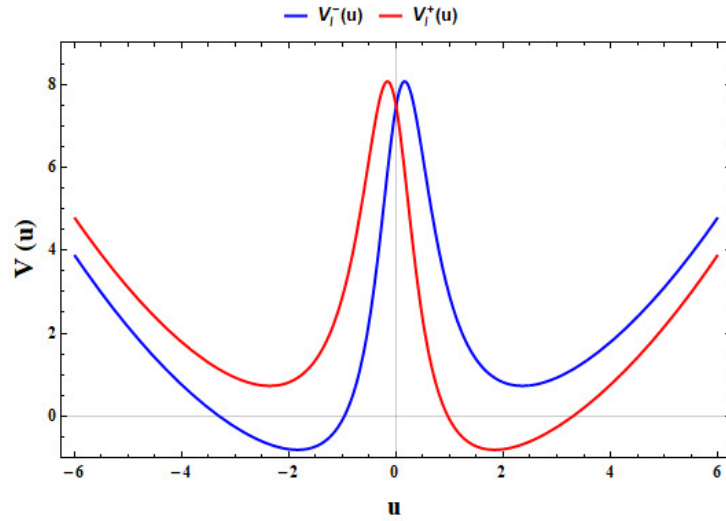


Figura 13 – Potencial efetivo de uma fita helicoidal para $l = 1$, $B = 0,8T$ e $\omega = 1,5 \text{ rad/nm}$.

3.2.1.3 Aplicação: densidade local de estados (LDOS)

Como já mencionado, um dos principais objetivos desse trabalho é analisar o comportamento dos estados na superfície helicoidal submetidos a um campo magnético externo. Para isso, precisamos calcular a LDOS do sistema, expressa na seguinte forma

$$\rho(u) = \frac{1}{2} \sum_{n,l} \left[|\Psi_{n,l}^+(u)|^2 + |\Psi_{n,l}^-(u)|^2 \right], \quad (3.87)$$

onde n é o número quântico principal.

Na Fig. 14, ilustramos os perfis da LDOS para dois valores de campo magnético: $B = 0,5T$ (painel à esquerda) e $B = 0,8T$ (painel à direita). Todos os estados ligados envolvidos na construção de $\rho(u)$ dado por (3.87) foram computados numericamente usando o método de Numerov.

Por (3.86), vemos que a altura da barreira entre os poços e o valor de ω são inversamente proporcionais, assim como a largura e o campo B . Na Fig. 15, observamos o mesmo comportamento do caso livre, ou seja, à medida que ω aumenta, a tendência dos estados é se concentrarem em regiões distantes do eixo do helicoides. No entanto, surpreendentemente, vemos que para valores de ω grandes o suficiente, como por exemplo $\omega = 10 \text{ rad/nm}$, a LDOS no eixo atinge um valor constante. Este ponto de densidade mínima de estados é aproximadamente $\rho_{min} \approx 0,8$ para $B = 0,5T$ e $\rho_{min} \approx 0,5$ para $B = 0,8T$ no eixo. Desse modo, podemos inferir que esse comportamento peculiar do sistema é um efeito do confinamento produzido pela configuração do campo magnético uniforme, que mantém alguns estados de partículas capturados no eixo do helicoides, independente do número de torções. Esse é um resultado surpreendente e altamente contraintuitivo e acreditamos que esteja relacionado ao chamado “ângulo crítico”, que já foi

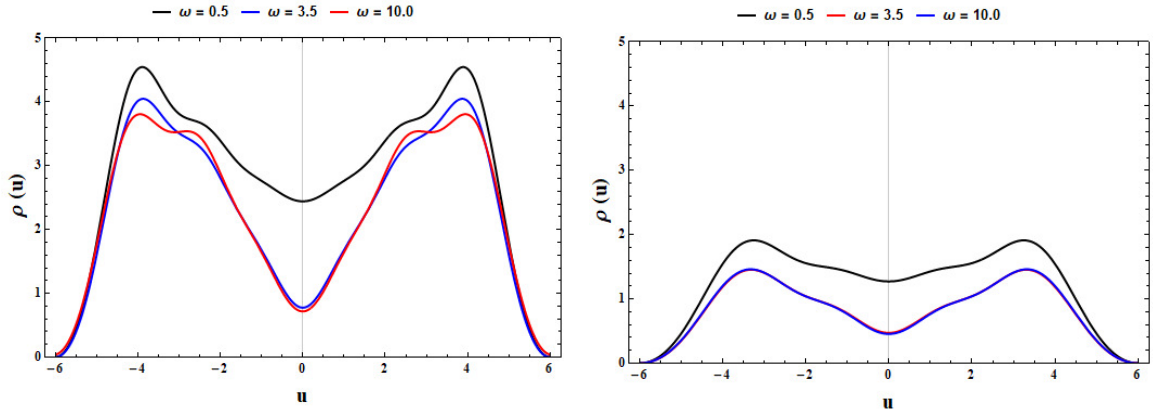


Figura 14 – LDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 0,5 \text{ rad/nm}$ (linha preta) e $\omega = 3,5 \text{ rad/nm}$ (linha azul) e $\omega = 10,0 \text{ rad/nm}$ (linha vermelha), sendo $l = 1$, $B = 0,5 T$ (painel à esquerda) e $B = 0,8 T$ (painel à direita).

estudado no contexto do grafeno em forma de nanofita helicoidal (CHOPIN; KUDROLLI, 2013; DINIZ, 2014). Tal ângulo determina o ponto de ruptura ou fratura da nanofita plana

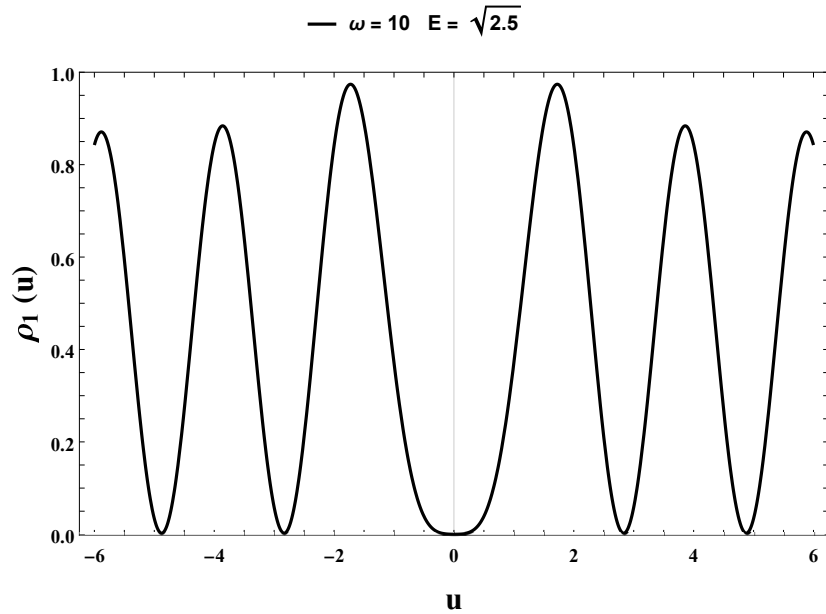


Figura 15 – LDOS $\rho_l(u)$ para $\omega = 10 \text{ rad/nm}$, $l = 1$, $B = 0$.

elástica sujeita a torção, que em nosso sistema é determinada por ω . Particularmente, Diniz (2014) mostra, via cálculos DFT (do inglês, *Density Functional Theory* ou Teoria do Funcional da Densidade), que uma rede isolada de grafeno se reconstrói após torcer além de um ângulo crítico. Este comportamento está tipicamente associado a algum tipo de transição de fase, que pode ser observada no diagrama de energia de torção, onde a descontinuidade na zona de transição ocorre exatamente no ângulo crítico. Embora em nossa análise não utilizemos métodos DFT, ainda é possível apreciar essas descontinuidades

para grandes valores de ω (fita fortemente torcida). Especificamente, os nossos potenciais efetivos se tornam

$$V_l^+ = \frac{(eBu - 2l)^2}{4u^2} \quad (3.88a)$$

$$V_l^- = \frac{eBu^2 + 2l}{2u^2} \quad (3.88b)$$

Podemos observar que as expressões (3.88a) e (3.88b) são singulares em $u = 0$. Além disso, suas soluções são singulares no mesmo ponto. Nesse sentido, podemos dizer que, para valores de $\omega < \omega_c$ (torção crítica), o sistema permanece em uma fase ordenada estável, onde a concentração predominante de estados ocorre na região próxima ao eixo da fita. Porém, conforme nos aproximamos do valor crítico ω_c , a LDOS adota um valor constante no eixo, que é um efeito produzido por aqueles estados aprisionados pelo campo magnético. Finalmente, quando $\omega = \omega_c$, a densidade local de estados torna-se descontínua devido aos estados singulares, o que significa que uma transição de fase está prestes a ocorrer. Na verdade, o que vimos até aqui, foi uma análise qualitativa do comportamento dos portadores de carga na fita de grafeno helicoidal para diferentes valores de ω . Nossos resultados representam uma extensão aos mostrados em [Watanabe et al. \(2015\)](#), onde é analisado apenas portadores de carga sem interação com campos externos. Por outro lado, a informação quantitativa sobre o ângulo de torção, sobre o comportamento elástico do helicóide, pode ser obtida por meio da análise da energia elástica. Para isso, faremos um breve estudo da teoria da elasticidade, como veremos no próximo capítulo.

CAPÍTULO 4

ENERGIA ELÁSTICA PARA O HELICOIDE

Estudar o grafeno com deformações, requer um conhecimento prévio de teoria de elasticidade, pois, tais deformações, dentro ou fora do plano, são oriundas de tensões que modificam a estrutura da rede. Isso nos possibilita conhecer novas propriedades do material. No presente capítulo, introduziremos dois tensores fisicamente importantes na teoria da elasticidade: tensor de deformação (u_{ik}) e tensor de tensão (σ_{ik}), além disso, discutiremos brevemente sobre a expansão da densidade de energia livre e sua relação com esses tensores. Em seguida, trazemos tal discussão para o nosso caso¹, ou seja, calcularemos u_{ik} , σ_{ik} e a energia elástica para a fita de grafeno com geometria helicoidal, tendo em vista que a forma geométrica da fita depende do número de torções ω e tensões que ela sofre. As seções iniciais deste capítulo tem como base a teoria da elasticidade de [Landau e Lifshitz \(1970\)](#).

4.1 Tensor de deformação

Podemos entender como deformação de um corpo sólido, o deslocamento dos seus pontos que pode influenciar na superfície e/ou volume do mesmo. Matematicamente, descrevemos a deformação da seguinte forma: seja um raio vetor \vec{r} com componentes $x_1 = x$, $x_2 = y$ e $x_3 = z$, antes da deformação e seja \vec{r}' com componentes $x'_1 = x'$, $x'_2 = y'$ e $x'_3 = z'$, após a deformação.

O deslocamento do ponto do corpo devido à deformação é expresso como

$$\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r} \quad (4.1)$$

que em componentes é dado como

$$u_i = x'_i - x_i. \quad (4.2)$$

¹ Aqui, estamos considerando apenas o caso livre.

Quando um corpo é deformado, a distância entre seus pontos é alterada. Desse modo, vamos considerar dois pontos muito próximos, onde dx_i e $dx'_i = dx_i + du_i$ são as componentes i do raio vetor que os une antes da deformação e depois da deformação, respectivamente. Assim, a distância entre esses pontos antes da deformação é

$$dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2} \quad (4.3)$$

e após a deformação

$$dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2}. \quad (4.4)$$

Utilizando a notação da soma de Einstein, é possível expressar o quadrado do elemento diferencial da seguinte forma

$$\begin{aligned} dl'^2 &= dx_i^2 + du_i^2 + 2dx_i du_i \\ dl'^2 &= dl^2 + \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right)^2 dx_k^2 + 2dx_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) dx_k \\ dl'^2 &= dl^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} dx_k dx_l, \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde

$$dl^2 = dx_i dx_i, \quad (4.6a)$$

$$dl'^2 = dx'_i dx'_i = (dx_i + du_i)^2, \quad (4.6b)$$

$$du_i = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) dx_k. \quad (4.6c)$$

No segundo termo de (4.5) à direita, há uma soma nos subíndices i e k . Desse modo, o reescrevemos como

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) dx_i dx_k = \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) dx_i dx_k. \quad (4.7)$$

Já no terceiro termo, permutamos os sufixos i e l . Assim, dl'^2 é reescrito como

$$\begin{aligned} dl'^2 &= dl^2 + \left(2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_l}\right) dx_i dx_k \\ dl'^2 &= dl^2 + \underbrace{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right)}_{2u_{ik}} dx_i dx_k \\ dl'^2 &= dl^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k, \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right). \quad (4.9)$$

O tensor u_{ik} é denominado *tensor de deformação* cuja expressões (4.8) e (4.9) significam a alteração em um elemento de comprimento quando há deformação. Notemos

que esse tensor é simétrico, pois não há alteração de sinal ao permutarmos seus índices, ou seja

$$u_{ik} = u_{ki}. \quad (4.10)$$

Nesse sentido, o tensor de deformação pode ser diagonalizado em qualquer ponto dado, ou seja, é possível escolhermos um eixo de coordenadas em um dado ponto, de tal forma que somente as componentes da diagonal principal, u_{11} , u_{22} e u_{33} , sejam diferentes de zero ².

Reescrevendo o elemento de comprimento (4.8) na forma

$$dl'^2 = (\delta_{ik} + 2u_{ik}) dx_i dx_k, \quad (4.11)$$

e aplicando a diagonalização, temos

$$dl'^2 = (1 + 2u^{(1)}) dx_1^2 + (1 + 2u^{(2)}) dx_2^2 + (1 + 2u^{(3)}) dx_3^2, \quad (4.12)$$

onde escrevemos $u_{ii} = u^{(i)}$ para $i = 1, 2, 3$. A partir de agora denominaremos $u^{(i)}$ de valores principais do tensor de deformação u_{ik} .

Verificamos que (4.12) é a soma de três termos independentes. Significando que a deformação em um volume é a composição de deformações em três direções mutuamente perpendiculares correspondentes aos eixos principais do tensor de deformação, ou seja, o elemento de comprimento dx_1 ao longo do primeiro eixo principal torna-se $dx'_1 = \sqrt{1 + 2u^{(1)}} dx_1$. De forma análoga acontece com o elementos de comprimentos dy' e dz' .

Para saber o percentual de deformação de um corpo em termos de deslocamento dos seus pontos, definimos o deslocamento relativo $\frac{dx'_i - dx_i}{dx_i}$, equivalente a $dx'_i = \sqrt{1 + 2u^{(i)}} dx_i$ ao longo do i -ésimo eixo principal. Isso é facilmente demonstrado, tendo como ponto de partida, subtrair dx_i em ambos os lados de $dx'_i = \sqrt{1 + 2u^{(i)}} dx_i$, ou seja

$$\begin{aligned} dx'_i - dx_i &= \sqrt{1 + 2u^{(i)}} dx_i - dx_i \\ dx'_i - dx_i &= \left(\sqrt{1 + 2u^{(i)}} - 1 \right) dx_i \\ \%D &= \frac{dx'_i - dx_i}{dx_i} = \left(\sqrt{1 + 2u^{(i)}} - 1 \right) dx_i. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Podemos citar como exemplo de aplicação da expressão (4.13), um grafeno com geometria helicoidal onde, devido à forças de deformação dentro e fora do plano, há um deslocamento de $dx = 4,26 \text{ \AA}$ para $dx'_1 = 4,4 \text{ \AA}$, nas regiões próximas ao eixo, cujo índice de deformação percentual é aproximadamente 3,3%, o que corresponde a um valor equivalente a $u^{(i)} \approx 8 \times 10^{-3}$. Esses e outros dados relacionados à deformação helicoidal, foram obtidos do trabalho experimental de [Zhang e Dumitrică \(2011\)](#).

² Vale ressaltar que se o tensor é diagonalizado em determinado ponto do corpo, o mesmo não pode ser diagonalizado em outro ponto.

4.2 Tensor de tensão

Um corpo não deformado encontra-se em um estado de equilíbrio térmico e mecânico. Ou seja, as moléculas que o compõe possuem agitação “quase nula” e a força resultante, ao considerarmos um pedaço desse corpo, é nula. Quando há deformação no corpo, as moléculas podem sofrer algum tipo de perturbação e, conseqüentemente, forças internas irão agir para que o estado de equilíbrio mecânico ocorra novamente.

Tais forças são denominadas de *tensão interna* e agem nas moléculas mais próximas em um tempo de ação bem curto. Isso faz com que na teoria da elasticidade essas forças sejam nulas e, por agirem apenas na vizinhança, consideramos que elas atuem somente na superfície do corpo considerado. É válido lembrar que uma força resultante (F_R) que atua em um corpo é a soma de todas as forças que atuam nos elementos de volume dV deste. Ou seja,

$$\vec{F}_R = \int \vec{F} dV \quad (4.14)$$

onde \vec{F} é a densidade de força (força por unidade de volume) e por unidade de volume dV . Essas forças atuam apenas na superfície, pois, pela Terceira Lei de Newton, no interior do elemento de volume, as forças se cancelam, restando apenas as forças na superfície.

Assim, a integral de volume em (4.14) deve ser transformada em integral de superfície. Para isso, utilizamos o teorema do divergente

$$\int_V \nabla \cdot \vec{F} dV = \oint_S \vec{F} \cdot \hat{n} dA \quad (4.15)$$

que, para o presente caso, devemos escrever \vec{F} como um divergente de um tensor de rank dois como segue

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \quad (4.16)$$

Desse modo,

$$\int F_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV, \quad (4.17)$$

onde podemos transformar a integral sobre a superfície fechada em uma integral sobre o volume fechado pela superfície substituindo o operador $\frac{\partial}{\partial x_k} dV$ pelo elemento de superfície df_i que são as componentes do vetor elemento de superfície $d\vec{f}$, ou seja

$$\int F_i dV = \oint \sigma_{ik} df_k. \quad (4.18)$$

O tensor σ_{ik} é chamado de *tensor de tensão*. Podemos dizer que esse tensor está relacionado às forças internas que tentam manter o corpo em equilíbrio quando este se deforma. Verificando (4.18), vemos que $\sigma_{ik} df_k$ é a i -ésima componente da força no elemento da superfície df .

Em se tratando de elemento de superfície, nos planos xy , yz e zx , notemos que o tensor σ_{ik} é a i -ésima componente da força por unidade de área perpendicular ao eixo

normal. Ou seja, a força por unidade de área perpendicular ao eixo x , normal a área, é σ_{xx} . No caso de forças tangenciais a esse eixo e ao longo dos eixos y e z as componentes são, respectivamente, σ_{yx} e σ_{zx} .

4.3 A termodinâmica da deformação

Nesta seção, iremos relacionar as quantidades termodinâmicas como a entropia S , a energia interna ε , entre outras, com os tensores de tensão e de deformação. Começamos pela energia interna ε , cuja mudança infinitesimal $d\varepsilon$ é igual a diferença entre o calor adquirido por unidade de volume. A quantidade de calor é, para um processo reversível, TdS , sendo T a temperatura. Assim,

$$d\varepsilon = TdS - dR, \quad (4.19)$$

onde $dR = Fdu_i$ é a diferencial do trabalho realizado pela força de tensão interna, isto é, aquela que deforma a rede. Assim, é possível mostrar que podemos expressar dR usando (4.18), ou seja, em termos dos tensores de tensão e deformação,

$$dR = -\sigma_{ik}du_{ik}. \quad (4.20)$$

Vemos que (4.20) nos dá o trabalho dR em termos da mudança no tensor de tensor.

$$d\varepsilon = TdS + \sigma_{ik}du_{ik}. \quad (4.21)$$

A equação (4.21) é a termodinâmica fundamental para corpos deformados. Lembrando que na compressão hidrostática o tensor de tensão é escrito $\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}$, onde p é a pressão sofrida pelo corpo, e multiplicando por du_{ik} temos

$$\sigma_{ik}du_{ik} = -p\delta_{ik}du_{ik}$$

$$\sigma_{ik}du_{ik} = -pdu_{ii}.$$

Se considerarmos o volume unitário, du_{ii} é simplesmente a variação nesse volume, ou seja, $du_{ii} = dV$. Assim, a relação (4.21) assume a forma já conhecida:

$$d\varepsilon = TdS - pdV. \quad (4.22)$$

Sendo a densidade de energia livre do corpo dada por

$$\varphi = \varepsilon - TS \quad (4.23)$$

podemos escrever

$$d\varphi = \underbrace{d\varepsilon}_{TdS - pdV} - TdS - SdT$$

$$\begin{aligned}
d\varphi &= TdS - pdV - TdS - SdT \\
d\varphi &= \underbrace{-pdV}_{\sigma_{ik}du_{ik}} - SdT \\
d\varphi &= -SdT + \sigma_{ik}du_{ik}.
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Temos também o potencial termodinâmico que pode ser definido como

$$\begin{aligned}
\Phi &= \underbrace{\varepsilon - TS}_{\varphi} - \sigma_{ik}u_{ik} \\
\Phi &= \varphi - \sigma_{ik}u_{ik}.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

A expressão (4.25) é a generalização da expressão já conhecida

$$\Phi = \varepsilon - TS + pdV. \tag{4.26}$$

Diferenciando (4.25), chegamos a

$$\begin{aligned}
d\Phi &= d\varphi - \sigma_{ik}du_{ik} - u_{ik}d\sigma_{ik} \\
d\Phi &= -SdT + \sigma_{ik}du_{ik} - \sigma_{ik}du_{ik} - u_{ik}d\sigma_{ik} \\
d\Phi &= -SdT - u_{ik}d\sigma_{ik}.
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Desse modo, as variáveis independentes nas equações (4.21) e (4.24) são, respectivamente, S , u_{ik} e T , u_{ik} . Podemos obter as componentes do tensor de tensão diferenciando ε ou φ com respeito às componentes do tensor de deformação para a entropia ou temperatura constante, respectivamente. Assim:

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial u_{ik}} \right)_S = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}} \right)_T. \tag{4.28}$$

Analogamente, encontramos o tensor de deformação pela diferenciação de Φ com respeito às componentes de σ_{ik} para uma temperatura constante:

$$u_{ik} = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}} \right). \tag{4.29}$$

4.4 Expansão da densidade de energia livre

Podemos calcular a energia elástica de um corpo relacionando-a com a densidade de energia livre. Para isso, expandimos a densidade de energia livre em termos de u_{ij} na forma

$$F(u) = F_0 + \frac{\partial F}{\partial u_{ij}}u_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial u_{ij} \partial u_{lk}}u_{ij}u_{lk}. \tag{4.30}$$

Consideremos somente até os termos de segunda ordem da expansão. De (4.28), reescrevemos (4.30) como

$$F(u) = F_0 + \sigma_{ij}u_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial u_{ij}} u_{ij}u_{lk}. \quad (4.31)$$

Observamos que a densidade de energia livre é quadrática, ou seja, $F \sim u^2$ e isso significa que

$$\frac{\partial F}{\partial u} \propto u \quad (4.32)$$

ou

$$\frac{\partial F}{\partial u_{ij}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{lk}. \quad (4.33)$$

onde C_{ijkl} é uma constante de proporcionalidade. Comparando (4.28) com (4.33), temos que

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{lk}. \quad (4.34)$$

E substituindo (4.34) em (4.31) chegamos a

$$F(u) = F_0 + \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{lk} u_{ik} + \frac{1}{2} R_{ijkl} u_{ij} u_{lk}, \quad (4.35)$$

sendo

$$R_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial u_{ij}}. \quad (4.36)$$

Podemos ainda escrever (4.35) com

$$F(u) = F_0 + \frac{1}{2} E_{ijkl} u_{ij} u_{lk}, \quad (4.37)$$

onde E_{ijkl} é o tensor de elasticidade definido na forma

$$E_{ijkl} = C_{ijkl} + R_{ijkl}. \quad (4.38)$$

Ao considerarmos apenas deformações isotrópicas (em todas as direções do corpo temos a mesma deformação), é proposto uma expressão para o tensor de rank-4 na forma:

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}). \quad (4.39)$$

em λ e μ são os coeficientes de Lamé. Fisicamente, μ é o coeficiente de maior relevância pois tem a função de controlar a tensão de corte em todas as direções. Substituindo (4.39) em (4.37), realizando algumas manipulações algébricas e escrevendo em termos das coordenadas x e y chegamos a

$$F(u) = F_0 + \frac{1}{2} \lambda (u_{xx} + u_{yy})^2 + \mu (u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + 2u_{xy}^2). \quad (4.40)$$

Vemos que $F(u)$ atua nas duas direções, logo, para calcularmos a energia elástica, tomamos uma integral de superfície dada por

$$E_{el} = \oint F d^2r. \quad (4.41)$$

Assim, substituindo (4.40) em (4.41), sendo $F_0 = 0$, chegamos a

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int \lambda (u_{xx} + u_{yy})^2 d^2r + \int \mu (u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + 2u_{xy}^2) d^2r. \quad (4.42)$$

Sabendo que o objeto de estudo da presente tese é uma fita de grafeno com geometria helicoidal, precisamos escrever a expressão da energia elástica (4.42) para a parametrização do helicóide, ou seja, no espaço (u, v) . Isso será feito relacionando os objetos matemáticos da Relatividade Geral com os da Teoria da Elasticidade, como veremos na próxima seção.

4.5 Energia elástica para o helicóide

Nas seções anteriores do presente capítulo, apresentamos grandezas relevantes para o estudo de um corpo que sofre deformações, a saber, tensor de tensão, tensor de deformação e energia elástica. O objetivo desta seção é implementar uma metodologia que permita escrever a energia elástica para o helicóide, em função dos parâmetros que definem essa geometria. Assim, como ponto de partida, é necessário relacionar os conceitos da Teoria da Elasticidade com os conceitos da Relatividade Geral, ou seja, realizar uma relação formal entre o tensor de tensão e a métrica no espaço curvo.

Primeiramente, vamos escrever a contribuição da deformação, dado pelo termo $2u_{ij}dx^i dx^j$, considerando unicamente deformações produzidas por forças em direção aos eixos coordenados. Isto implica na seguinte expressão:

$$2u_{ij}dx^i dx^j = 2u_{xx}dx^2 + 2u_{yy}dy^2 + 2u_{zz}dz^2, \quad (4.43)$$

onde os elementos infinitesimais dx , dy e dz podem ser expressos em função dos elementos da parametrização do helicóide (3.1), ou seja,

$$dx = dv, \quad (4.44a)$$

$$dy = \cos(\omega v) du - u\omega \sin(\omega v) dv, \quad (4.44b)$$

$$dz = \sin(\omega v) du + u\omega \cos(\omega v) dv. \quad (4.44c)$$

E assim, substituindo (4.44) em (4.43) e agrupando os termos semelhantes, chegamos a

$$\begin{aligned} 2u_{ij}dx^i dx^j &= du^2 [2u_{yy} \cos^2(\omega v) + 2u_{zz} \sin^2(\omega v)] + \\ &dv^2 [2u_{xx} + 2u_{yy}u^2\omega^2 \sin^2(\omega v) + 2u_{zz}u^2\omega^2 \cos^2(\omega v)] + \\ &dudv [4u\omega \sin(\omega v) \cos(\omega v) (u_{zz} - u_{yy})]. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Usaremos a expressão (4.45) para identificarmos a relação entre as componentes do tensor de deformação no espaço (x, y, z) , com as componentes definidas no espaço da parametrização (u, v) , a saber, u_{uu} , u_{vv} , u_{uv} e u_{vu} . Isso é necessário, pois, a energia elástica é expressa em função dos elementos u_{xx} , u_{yy} e u_{zz} , já visto em (4.42). Desse modo,

reescrevemos (4.45) em função dos elementos da parametrização (u, v) , que, neste espaço, o tensor de deformação também é diagonal. Logo, impomos a seguinte relação:

$$2u_{ij}dx^i dx^j = 2u_{vv}dv^2 + 2u_{uu}du^2. \quad (4.46)$$

Comparando (4.45) com (4.46), podemos identificar as seguintes relações:

$$u_{uu} = 2u_{yy} \cos^2(\omega v) + 2u_{zz} \sin^2(\omega v), \quad (4.47a)$$

$$u_{vv} = 2u_{xx} + 2u_{yy}u^2\omega^2 \sin^2(\omega v) + 2u_{zz}u^2\omega^2 \cos^2(\omega v), \quad (4.47b)$$

$$u_{uv} = 4u\omega \sin(\omega v) \cos(\omega v) (u_{zz} - u_{yy}). \quad (4.47c)$$

Lembrando que o elemento quadrático infinitesimal definido por uma parametrização, é expresso de forma geral como

$$ds^2 = g_{ij}d\chi^i d\chi^j, \quad (4.48)$$

onde $\chi^{(i)}$ representa a componente (i) da parametrização. Essa expressão possui grande relevância, pois, é útil para representar superfícies deformadas em sistemas de estados sólidos bidimensionais, como podemos ver em Garcia et al. (2020) e Azevedo et al. (2021). Nesse sentido, ao compararmos com (4.11), podemos definir a seguinte relação:

$$g_{(i)(j)} = \delta_{(i)(j)} + 2u_{(i)(j)}, \quad (4.49)$$

onde $\delta_{(i)(j)}$ é o delta de Kronecker e $u_{(i)(j)}$ representa aos elementos do tensor de deformação nessa parametrização. Em nosso contexto, a geometria helicoidal é definida pelos parâmetros (u, v) , com os quais, tal como foi mostrado em (3.5), é possível definir uma métrica diagonal, cuja parte espacial é dada por

$$g_{(i)(j)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + u^2\omega^2 \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

Notemos que as componentes g_{uv} e g_{vu} do tensor são nulas. Assim, usando (4.49), temos que

$$u_{uv} = u_{vu} = 0. \quad (4.51)$$

Por outro lado, considerando os elementos da diagonal $g_{uu} = 1$ e $g_{vv} = 1 + u^2\omega^2$, obtemos

$$u_{uu} = 0, \quad (4.52a)$$

$$u_{vv} = \frac{u^2\omega^2}{2}. \quad (4.52b)$$

Com os resultados acima, podemos encontrar u_{xx} , u_{yy} e u_{zz} , a partir de (4.47) e (4.51), ao substituirmos nas expressões (4.47), pois, considerando $u_{uv} = u_{vu} = 0$ em (4.47c) implica $u_{zz} = u_{yy}$. Ao substituirmos esse resultado em (4.47a), encontramos $u_{uu} = u_{yy} = u_{zz}$ os quais são nulos devido a condição (4.52a). Desse modo, substituindo em (4.47), encontramos $u_{xx} = \frac{u^2\omega^2}{4}$. Resumindo:

$$u_{xx} = \frac{u^2\omega^2}{4}, \quad (4.53a)$$

$$u_{yy} = u_{zz} = 0. \quad (4.53b)$$

Os resultados obtidos em (4.53) nos mostra a relação entre os componentes do tensor de deformação no espaço plano com os elementos de tensor de deformação na parametrização do helicóide. Isso permite escrever a energia elástica para a fita de grafeno helicoidal no espaço (u, v) . Assim, substituindo as componentes (4.53) em (4.42), e, considerando o elemento diferencial de área do helicóide como

$$dr^2 = \sqrt{1 + u^2\omega^2} dudv, \quad (4.54)$$

chegamos à energia elástica para o helicóide, expressa como

$$E_{el} = F_0 \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-D/2}^{D/2} \sqrt{1 + u^2\omega^2} dudv + \left(\frac{\lambda}{2} + \mu\right) \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-D/2}^{D/2} \left(\frac{u^2\omega^2}{2}\right)^2 \sqrt{1 + u^2\omega^2} dudv, \quad (4.55)$$

lembrando que L e D correspondem ao comprimento e a largura da fita, respectivamente. Calculando (4.55), encontramos

$$E_{el} = LD\sqrt{D^2\omega^2 + 4} \operatorname{arcsenh}\left(\frac{D\omega}{2}\right) \left(\frac{\omega + 4}{4\omega}\right) + \frac{1}{768\omega} LD\sqrt{D^2\omega^2 + 4} \operatorname{arcsenh}\left(\frac{D\omega}{2}\right) \left(\frac{\lambda}{2} + \mu\right) [D^4\omega^4 + D^2\omega^2 + 16] \quad (4.56)$$

A partir de (4.56), iremos analisar graficamente o perfil da energia elástica em função do ângulo de torção θ para dois casos. No primeiro, comparamos três fitas de grafeno helicoidal com comprimentos diferentes e mesma largura, sujeitas ao mesmo ângulo de torção. Intuitivamente pensando, a fita de menor comprimento, vai sofrer maior deformação, pois vai “sentir” a torção com maior intensidade. Esse comportamento é verificado na Fig. 16, que mostra o perfil da energia elástica E_{el} do grafeno helicoidal como função do ângulo de torção θ , para $L = \pi nm$ (linha cheia), $L = 3\pi nm$ (linha tracejada) e $L = 5\pi nm$ (linha traço-ponto). Notemos que a energia elástica aumenta progressivamente em todos os casos, porém, para $L = 3\pi nm$, a curva da E_{el} aumenta mais rapidamente para ângulos menores quando comparado com $L = 5\pi nm$. Isso significa que a deformação será menor quando a fita de grafeno apresenta um comprimento maior, e vice-versa. O perfil da Fig. 16 é consistente com o que é mostrado em [Guinea, Horovitz e Doussal \(2008\)](#) e [Zhan et al. \(2017\)](#).

No segundo caso, mostrado da Fig. 17, analisamos o comportamento da energia elástica do grafeno helicoidal para um comprimento L fixo com larguras $D = 8 nm$ (linha cheia), $D = 12 nm$ (linha tracejada) e $D = 16 nm$ (linha traço-ponto). Observamos que a energia elástica, em um determinado intervalo do ângulo de deformação θ , muda lentamente

para larguras maiores, e vice-versa. Ou seja, uma fita de grafeno sente uma menor (maior) torção quando possui uma largura menor (maior). Observamos então, que, em ambos os casos, a energia elástica é contínua e aumenta exponencialmente com o ângulo de torção. Os resultados apresentados mostram um comportamento coerente com aquele encontrado na literatura experimental (GUINEA; HOROVITZ; DOUSSAL, 2008; ZHAN *et al.*, 2017), porém, no ponto de vista de um modelo teórico. Nesse sentido, consideramos que a relevância desta seção está baseada no estudo de uma metodologia que vincula elementos da Teoria da Elasticidade com a Relatividade Geral. As relações encontradas podem ser usadas para calcular outras grandezas além da energia elástica, por exemplo, podemos realizar uma análise termodinâmica das propriedades elásticas, construir uma modelagem de novas teorias efetivas com termos oriundos do processo de deformação, entre outros. É importante mencionar, que a análise do ângulo crítico não é viável no contexto desta seção, pois, para isso, é necessário uma abordagem com técnicas próprias do DFT.

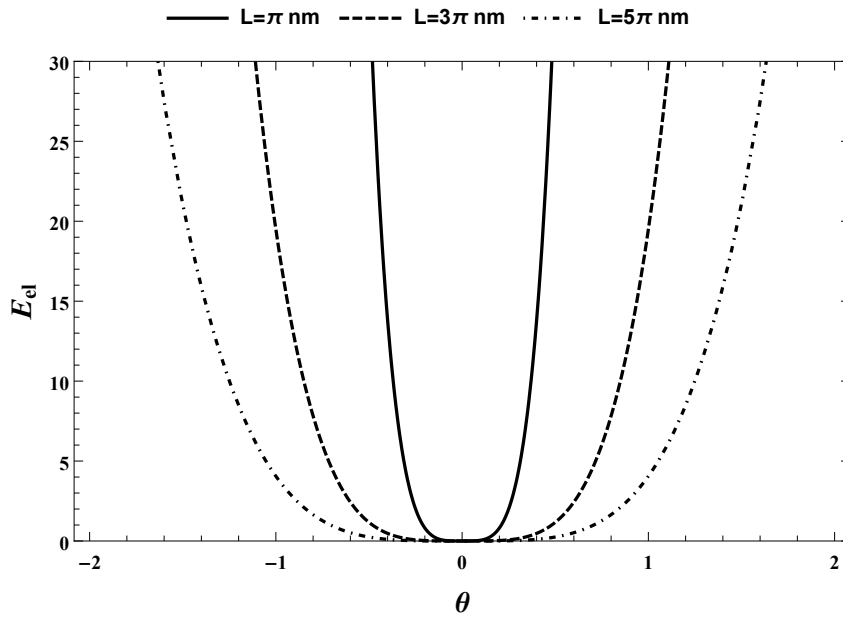


Figura 16 – Perfil da energia elástica E_{el} de uma fita de grafeno helicoidal em função do ângulo de torção θ , com largura fixa D e comprimentos $L = \pi \text{ nm}$ (linha cheia), $L = 3\pi \text{ nm}$ (linha tracejada) e $L = 5\pi \text{ nm}$ (linha traço-ponto). Notemos que E_{el} aumenta progressivamente em todos os casos, porém, para $L = 3\pi \text{ nm}$, a curva da E_{el} aumenta mais rapidamente para ângulos menores quando comparado com $L = 5\pi \text{ nm}$.

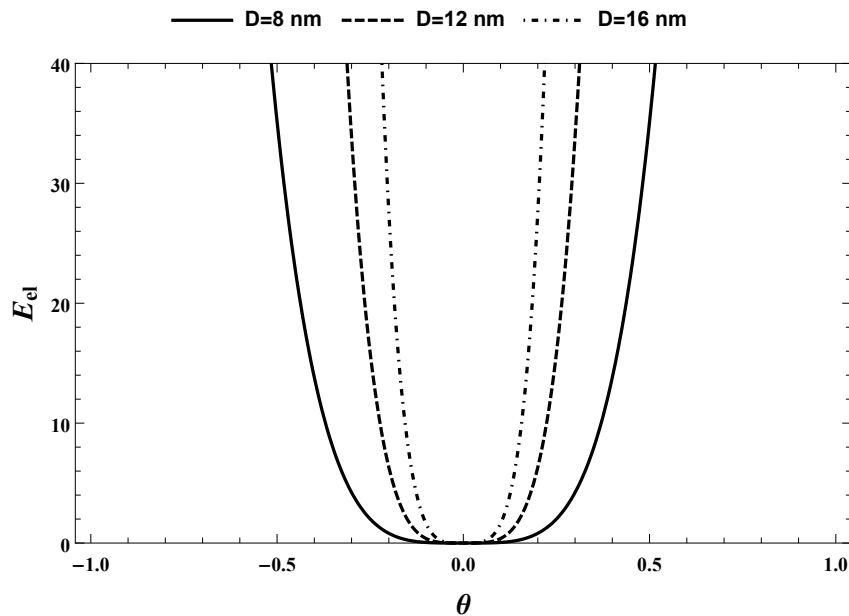


Figura 17 – Perfil da energia elástica E_{el} de uma fita de grafeno helicoidal em função do ângulo de torção θ , com comprimento fixo L e larguras $D = 8 \text{ nm}$ (linha cheia), $D = 12 \text{ nm}$ (linha tracejada) e $D = 16 \text{ nm}$ (linha traço-ponto). Observamos que a energia elástica, em um determinado intervalo do ângulo de deformação θ , muda lentamente para larguras maiores, e vice-versa.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Estudamos o problema de férmions de Dirac sem massa em uma fita de grafeno movendo-se em $(2 + 1)$ dimensões em uma superfície helicoidal. Para melhor compreensão sobre esse material, discutimos brevemente sobre o carbono e suas formas alotrópicas, dando ênfase ao grafeno. Em seguida, descrevemos a formulação física para o grafeno, mostrando sua estrutura e a aplicação do modelo *tight-binding*, realizando assim uma conexão com a equação de Dirac. Devido a geometria que escolhemos, ou seja, um helicóide, escrevemos o formalismo de Dirac no espaço-curvo. Além disso, mostramos que a decomposição padrão desta equação de Dirac em suas componentes superior e inferior produz um conjunto de duas equações do tipo Schrödinger supersimétricas. Dessa forma, analisamos o nosso trabalho em dois casos: i) portadores de cargas livres no grafeno helicoidal e ii) portadores de carga na presença de um campo magnético uniforme alinhado ao longo do eixo da fita de grafeno helicoidal.

Para o primeiro caso, analisamos o comportamento do potencial efetivo para diferentes valores de ω , onde fixamos os valores do comprimento e largura da fita. Observamos que os potenciais efetivos são formados por barreiras de potenciais, isso implica que apenas estados de espalhamento estão presentes. Também verificamos que o pico da barreira de potencial é diretamente proporcional ao valor de ω que está relacionado à torção em torno do eixo do helicóide e que afeta diretamente a concentração de estados nesse eixo. O comportamento da concentração de estados foi analisado a partir dos conceitos da LDOS (densidade local de estados, do inglês *local density of states*). Para pequenos valores de ω (fita levemente torcida), observamos uma LDOS cuja região de concentração ocorre em pontos próximos ao eixo da fita. No entanto, quando ω aumenta, a intensidade repulsiva da barreira também aumenta, fazendo com que a concentração de estados se desloque em regiões distantes do eixo, onde a densidade parcial de estados tende a zero.

No segundo caso, o potencial efetivo para cada componente é formado por dois poços de potencial separados por uma barreira finita, o qual é completamente confinante devido

à presença do campo magnético. No entanto, o número de estados ligados é finito porque as dimensões da fita helicoidal também são finitas. Observou-se que o comportamento da LDOS para B uniforme é o mesmo que no caso livre para valores semelhantes de ω . No entanto, para valores suficientemente grandes de ω (fita fortemente torcida), a LDOS sobre o eixo atinge um valor constante de densidade mínima, ou seja, independente de quantas vezes o helicóide seja torcido, sempre haverá uma concentração de estados em seu eixo. Este novo resultado nos faz pensar que isso é uma consequência da escolha da configuração (direção) do campo magnético uniforme.

Como mencionado, uma realização experimental viável de nossos resultados pode ocorrer no contexto da Física da Matéria Condensada, particularmente, no estudo das transições de fase onde o ângulo de torção (associado ao nosso ω), é utilizado como parâmetro de controle, que determina o ponto de ruptura de uma nanofita elástica sujeita a torção. Tal conexão com o ângulo crítico foi realizada a partir de uma abordagem qualitativa. Quantitativamente falando, pudemos obter mais informações sobre o ângulo de torção a partir do perfil da energia elástica, onde relacionamos a Teoria da Elasticidade com a Relatividade Geral, a partir dos elementos pré-definidos na literatura. Assim, pudemos escrever uma energia elástica para a nossa parametrização, afim de analisarmos o comportamento desta frente ao ângulo de torção θ . Verificamos que tal energia é contínua e aumenta de forma exponencial com relação ao ângulo de torção, o que corrobora com resultados já encontrados na literatura experimental, ressaltando que no ponto de vista de um modelo teórico, pois, para analisarmos o ângulo crítico, por exemplo, será necessário a aplicação das técnicas do DFT. Além dessa discussão, vale salientar que as relações encontradas são relevantes no que tange encontrar outras grandezas, tais como na termodinâmica da deformação, o que sugere uma proposta para trabalhos futuros. Outra sugestão, é implementar uma expressão geral da energia elástica para superfícies curvas, a partir da metodologia apresentada nesta tese. A presente pesquisa originou o trabalho *Effects of a Uniform Magnetic Field on Twisted Graphene Nanoribbons* publicado na revista *Annalen der Physik (Ann. Phys. (Berlin))* 2023, 535, 2200258, DOI: 10.1002/andp.202200258, vide anexo A.

REFERÊNCIAS

- ALEIXO, A. N. F.; BALANTEKIN, A. B.; RIBEIRO, M. A. C. Barrier penetration for supersymmetric shape-invariant potentials. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 33, n. 8, p. 1503, 2000. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/33/i=8/a=302>>. Citado na página 38.
- AMORIM, R. et al. Elementos de geometria riemaniana: Análise da esfera s2. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 37, p. 2302–1 – 2302–9, 06 2015. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172015000200003&nrm=iso>. Citado 2 vezes nas páginas 87 e 88.
- AOKI, H. et al. Electronic structure of periodic curved surfaces: Topological band structure. *Physical Review B*, APS, v. 65, n. 3, p. 035102, 2001. Citado na página 16.
- ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R.; SAXENA, A. Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon. *Physical Review B*, APS, v. 79, n. 3, p. 033404, 2009. Citado na página 17.
- ATANASOV, V.; SAXENA, A. Helicoidal graphene nanoribbons: Chiraltronics. *Physical Review B*, APS, v. 92, n. 3, p. 035440, 2015. Citado na página 16.
- AZEVEDO, F. d. S. et al. Optical wormhole from hollow disclinations. *Physical Review A*, APS, v. 103, n. 2, p. 023516, 2021. Citado na página 60.
- BURCHELL, T. D. *Carbon materials for advanced technologies*. [S.l.]: Elsevier, 1999. Citado na página 22.
- CARTAN, É. Sur les variétés à connexion affine et la théorie de la relativité généralisée (première partie). In: *Annales scientifiques de l'École normale supérieure*. [S.l.: s.n.], 1923. v. 40, p. 325–412. Citado na página 90.
- CHOPIN, J.; KUDROLLI, A. Helicoids, wrinkles, and loops in twisted ribbons. *Physical Review Letters*, APS, v. 111, n. 17, p. 174302, 2013. Citado na página 50.
- COOPER, F.; GINOCCHIO, J. N.; KHARE, A. Relationship between supersymmetry and solvable potentials. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 36, p. 2458–2473, Oct 1987. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.36.2458>>. Citado na página 38.

- DARTORA, C. A.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em (1+2) D e o grafeno. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 37, 09 2015. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172015000300301&nrm=iso>. Citado 9 vezes nas páginas 11, 15, 20, 25, 26, 27, 28, 29 e 77.
- DINIZ, E. M. Self-reconstruction and predictability of bonds disruption in twisted graphene nanoribbons. *Applied Physics Letters*, American Institute of Physics, v. 104, n. 8, p. 083119, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 50.
- DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, The Royal Society London, v. 117, n. 778, p. 610–624, 1928. Citado na página 85.
- EINSTEIN, A. New possibility for a unified field theory of gravity and electricity. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften. Physikalisch-Mathematische Klasse*, p. 223–227, 1928. Citado na página 85.
- EINSTEIN, A. Riemannian geometry with preservation of the concept of distant parallelism. *Sitzungsberichte der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse*, v. 17, p. 217, 1928. Citado na página 85.
- FERNÁNDEZ, A. C. *Propiedades físicas de grafeno en presencia de desorden topológico*. Tese (Doutorado) — Universidad Carlos III de Madrid, 2007. Citado na página 19.
- FERNÁNDEZ, F. M. Wronskian method for one-dimensional quantum scattering. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers, v. 79, n. 8, p. 877–881, 2011. Nenhuma citação no texto.
- FIALKOVSKIY, I. *Efeito Casimir e as propriedades óticas do grafeno*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2012. Citado na página 15.
- FONSECA, J. et al. Nanotubos de carbono| propriedades e funcionalização/carbon nanotubes: Properties and functionalization/nanotubos de carbono: Propiedades y funcionalización. *Egitania Ciencia*, Instituto Politécnico da Guarda, n. 9, p. 7, 2011. Citado na página 23.
- GALLERATI, A. Graphene properties from curved space dirac equation. *The European Physical Journal Plus*, Springer Science and Business Media LLC, v. 134, n. 5, May 2019. ISSN 2190-5444. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjp/i2019-12610-6>>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 16 e 20.
- GARCIA, G. et al. Graphene wormhole trapped by external magnetic field. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 950, p. 114853, 2020. Citado na página 60.
- GONG, J. R. *Graphene: Synthesis, Characterization, Properties and Applications*. [S.l.]: BoD–Books on Demand, 2011. Citado na página 19.
- GRATTON, J. *Introducción a la mecánica cuántica*. Buenos Aires, 2003. Disponível em: <<http://www.lfp.uba.ar/es/notas%20de%20cursos/notasmecanicacuantica/Cuantica.pdf>>. Acesso em: 14 set. 2016. Nenhuma citação no texto.

- GU, X.-Q.; WANG, S.-Y.; YIN, W.-Y. Optical responses of planar composites consisting of monolayer graphene sheets and axially helicoidal (bi) anisotropic films. *Optics Communications*, Elsevier, v. 313, p. 9–14, 2014. Citado na página 16.
- GUINEA, F.; HOROVITZ, B.; DOUSSAL, P. L. Gauge field induced by ripples in graphene. *Physical Review B*, APS, v. 77, n. 20, p. 205421, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 19, 61 e 62.
- HAIRER, E.; NØRSETT, S. P.; WANNER, G. *Solving ordinary differential equations. 1, Nonstiff problems*. [S.l.]: Springer-Vlg, 1993. Citado na página 43.
- IORIO, A.; LAMBIASE, G. Quantum field theory in curved graphene spacetimes, lobachevsky geometry, weyl symmetry, hawking effect, and all that. *Physical Review D*, APS, v. 90, n. 2, p. 025006, 2014. Citado na página 16.
- JR, M. C. R. et al. Quantum particle motion on the surface of a helicoid in the presence of an harmonic oscillator. *Physics Open*, Elsevier, v. 5, p. 100045, 2020. Citado na página 16.
- KITTEL, C. *Introdução À Física Do Estado Sólido*. [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2000. Citado na página 25.
- KRIEGER, J. *Computerphysik und numerik*. 2006. Citado na página 92.
- KROTO, H. W. et al. C 60: buckminsterfullerene. *nature*, Nature Publishing Group, v. 318, n. 6042, p. 162–163, 1985. Citado na página 23.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Theory of elasticity*. [S.l.]: Pergamon Press, 1970. Citado na página 52.
- MACHADO, K. D. *Teoria do eletromagnetismo*. Ponta Grossa: UEPG, 2002. v. 2. Citado na página 81.
- MIYAZAKI, D. R. et al. Modelos de polímeros utilizando o hamiltoniano de tight-binding. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 44, 2022. Citado na página 17.
- MORAAL, H. Generalized wronskian theorem and integral representations for phase shift differences. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 46, n. 1, p. 71–72, 1973. Nenhuma citação no texto.
- MUSCELLI, W. C. *Preparação e caracterização de materiais de carbono via termopolimerização de pré-polímero fenol-formaldeído*. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 23.
- NI, Y. et al. Enhanced functional properties of chitosan films incorporated with curcumin-loaded hollow graphitic carbon nitride nanoparticles for bananas preservation. *Food Chemistry*, Elsevier, v. 366, p. 130539, 2022. Citado na página 15.
- PENHA, M. F. M. *Emergência de um estado atômico frustrado como um modo de energia zero no grafeno bicamada torcido pelo primeiro ângulo mágico*. Dissertação (Mestrado), 2021. Citado na página 34.
- PIERSON, H. O. *Handbook of carbon, graphite, diamonds and fullerenes: processing, properties and applications*. [S.l.]: William Andrew, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 22.

ROCHA, A.; RIZZUTI, B.; MOTA, D. Transformações de Galileu e de Lorentz: um estudo via teoria de grupos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 35, p. 1 – 9, 12 2013. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172013000400004&nrm=iso>. Citado na página 81.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica quântica moderna*. Porto Alegre: Bookman, 2013. Citado na página 77.

SANTONOCITO, R. et al. Fluorescence sensing by carbon nanoparticles. *Nanoscale Advances*, Royal Society of Chemistry, v. 4, n. 8, p. 1926–1948, 2022. Citado na página 15.

SANTOS, L. C. N. dos. *Alguns resultados no estudo de férmions e bósons em espaços curvos: soluções das equações de Dirac e Klein-Gordon*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2015. Disponível em: <<https://repositorio.ufsc.br/xmlui/handle/123456789/132980>>. Acesso em: 20 jan. 2020. Citado na página 81.

SILVA, D. d. *Sistemas curvos de grafeno e esferas fuzzy*. Dissertação (Mestrado), 2017. Citado 3 vezes nas páginas 15, 30 e 31.

SMIRNOV, A.; JR., A. J. D. F. Representações da equação de Dirac em 1+1 dimensões. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 38, 00 2016. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172016000300411&nrm=iso>. Citado na página 72.

SOARES, C. C. *Espalhamento quântico unidimensional via mecânica quântica supersimétrica*. Dissertação (Mestrado), 2017. Citado na página 38.

SOLOMONS, T. G.; FRYHLE, C. B. *Química orgânica*. Rio de Janeiro: LTC, 2001. v. 1. Citado na página 20.

SOROKINA, E.; OBRAZTSOVA, E. Effect of carbon nanoparticles with different structural organization on the biological systems of escherichia coli k12 tgi. *Microbiology*, Springer, v. 91, n. 3, p. 286–291, 2022. Citado na página 15.

SOUSA, M. F. D. *Estudo do grafeno na presença de desclinações*. Tese (Doutorado), 2019. Citado na página 16.

SOUZA, J. F. O. *Nanoestruturas de grafeno e o problema do confinamento de partículas de Dirac na descrição do contínuo*. Dissertação (Mestrado), 2014. Citado na página 34.

SUKUMAR, C. V. Supersymmetry, factorisation of the Schrodinger equation and a hamiltonian hierarchy. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 18, n. 2, p. L57, 1985. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/18/i=2/a=001>>. Citado na página 38.

SULANGI, M. A.; JR, Q. M. S. The effect of the geometric potential and an external magnetic field on a charged particle on a helicoid. *arXiv preprint arXiv:1211.5699*, 2012. Citado na página 17.

VÁSQUEZ, A. E. O. *Anomalias e números fermiônicos induzidos em grafeno com deformações*. Tese (Doutorado), 2016. Citado 10 vezes nas páginas 11, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 e 29.

- VENETIS, J. An analytic exact form of the unit step function. *Mathematics and Statistics*, v. 2, n. 7, p. 235–237, 2014. Citado na página 40.
- VERÇOSA, D. G. *Torção natural em nanotubos de carbono de parede simples*. Dissertação (Mestrado), 2012. Citado na página 34.
- VOZMEDIANO, M. A.; KATSNELSON, M.; GUINEA, F. Gauge fields in graphene. *Physics Reports*, Elsevier, v. 496, n. 4-5, p. 109–148, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 31.
- WATANABE, M. et al. Electronic structure of helicoidal graphene: Massless dirac particles on a curved surface with a screw symmetry. *Physical Review B*, APS, v. 92, n. 20, p. 205425, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 16, 17, 18, 44 e 51.
- YEPEZ, J. Einstein's vierbein field theory of curved space. arxiv 2011. *arXiv preprint arXiv:1106.2037*, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 85, 88, 89 e 90.
- ZHAN, H. et al. Graphene helicoid as novel nanospring. *Carbon*, Elsevier, v. 120, p. 258–264, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 19, 61 e 62.
- ZHANG, D.-B.; DUMITRICĂ, T. Effective-tensional-strain-driven bandgap modulations in helical graphene nanoribbons. *Small*, Wiley Online Library, v. 7, n. 8, p. 1023–1027, 2011. Citado na página 54.
- ZHANG, D.-B.; SEIFERT, G.; CHANG, K. Strain-induced pseudomagnetic fields in twisted graphene nanoribbons. *Physical review letters*, APS, v. 112, n. 9, p. 096805, 2014. Citado na página 17.
- ZHANG, W. et al. Defect interaction and deformation in graphene. *The Journal of Physical Chemistry C*, ACS Publications, v. 124, n. 4, p. 2370–2378, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 19.

Apêndices

APÊNDICE A

EQUAÇÃO DE DIRAC

Neste capítulo, falaremos brevemente sobre a equação de Dirac nos espaços plano e curvo. Sendo que para o presente trabalho, usaremos tal equação no segundo espaço. Sabendo que a equação de Dirac é uma equação de onda relativística proposta em 1928 por Paul Dirac, cujo objetivo é descrever partículas elementares de spin 1/2, faremos sua aplicação na descrição de portadores de carga no grafeno e, além disso, aplicá-la ao grafeno na presença de defeitos topológicos.

A.1 Equação de Dirac no espaço plano

Para falarmos da equação de Dirac no espaço plano, seguiremos de perto o trabalho de [Smirnov e Jr. \(2016\)](#) que abordam de forma simples e sucinta sua dedução¹. Iniciamos pela lei de conservação da energia mecânica que diz que a energia total E de um sistema conservativo é constante

$$K + V = E = \text{constante} \quad (\text{A.1})$$

onde

$$K = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (\text{energia cinética}) \quad (\text{A.2})$$

e

$$V = V(r) \quad (\text{energia potencial}), \quad (\text{A.3})$$

sendo m a massa das partículas e a energia potencial dependente das coordenadas do sistema. Substituindo (A.2) e (A.3) em (A.1)

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r). \quad (\text{A.4})$$

¹ Desse modo, dispensaremos sua citação ao longo do texto, salvo outra referência.

Podemos construir a equação de onda não relativística a partir de (A.1), escrevendo E , \vec{p} e $r = (x, y, z)$ na forma de operadores que atuam em uma função de onda ψ , ou seja:

$$\begin{aligned}
 E &\rightarrow \widehat{E}\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \\
 x &\rightarrow \widehat{x}\psi = x\psi \\
 y &\rightarrow \widehat{y}\psi = y\psi \\
 z &\rightarrow \widehat{z}\psi = z\psi \\
 p_x &\rightarrow \widehat{p}_x\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x} \\
 p_y &\rightarrow \widehat{p}_y\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial y} \\
 p_z &\rightarrow \widehat{p}_z\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial z}.
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

Desse modo substituímos (A.5) em (A.4) e chegamos á equação de Schrödinger dependente do tempo, que tem como objetivo descrever uma partícula quântica não relativística sujeita a um campo potencial V :

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \psi. \tag{A.6}$$

A derivada temporal de primeira ordem da equação (A.6) mostra a evolução no tempo da partícula. Para o caso de uma partícula relativística, é preciso que a derivada temporal também seja de primeira ordem. Iniciamos a construção da equação de onda relativística sabendo que a energia para este caso é

$$E^2 = p_x^2 c^2 + p_y^2 c^2 + p_z^2 c^2 + (mc^2)^2, \tag{A.7}$$

onde m é a massa da partícula, c é a velocidade da luz e $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ é o momento relativístico. Substituindo (A.5) em (A.7) e dividindo por $c^2 \hbar^2$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 = 0. \tag{A.8}$$

Observamos que a derivada em relação ao tempo de (A.8) é de segunda ordem. Para resolver o problema, aplicamos a raiz quadrada em (A.7)

$$E = \sqrt{p_x^2 c^2 + p_y^2 c^2 + p_z^2 c^2 + (mc^2)^2}, \tag{A.9}$$

e reescrevemos na forma de operadores. Fazendo isto, temos que extrair tais operadores das raízes, cuja interpretação não é possível. Para manter a igualdade de (A.9), podemos escrever E como a combinação linear:

$$E = \alpha_1 p_x c + \alpha_2 p_y c + \alpha_3 p_z c + \beta mc^2. \tag{A.10}$$

Elevando (A.10) ao quadrado e fazendo rearranjo de termos obtemos:

$$\begin{aligned}
 E^2 = & (\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1) p_x p_y c^2 + (\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2) p_y p_z c^2 + (\alpha_1\alpha_3 + \alpha_3\alpha_1) p_x p_z c^2 + \\
 & (\alpha_1\beta + \beta\alpha_1) mc^2 p_x + (\alpha_2\beta + \beta\alpha_2) mc^2 p_y + (\alpha_3\beta + \beta\alpha_3) mc^2 p_z + \\
 & \alpha_1^2 p_x^2 c^2 + \alpha_2^2 p_y^2 c^2 + \alpha_3^2 p_z^2 c^2 + \beta^2 (mc^2)^2.
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Comparando (A.11) com (A.7) chegamos às seguintes condições dos coeficientes α e β , sendo $i, j = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned}
 \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 0 \text{ para } i \neq j \\
 \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0 \\
 \alpha_i^2 &= 1 \\
 \beta^2 &= 1.
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

Pelas condições (A.12) verificamos que os coeficientes α_i e β não podem ser números, pois não obedecem a lei de comutação, $x_i x_j = x_j x_i$. Desse modo, os consideraremos como matrizes de dimensão mínima 4×4 . Essas matrizes são denominadas *matrizes de Dirac*.

Substituindo (A.5) em (A.10) e dividindo por $c\hbar$, temos

$$\frac{i}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} - i\alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} - i\alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{\beta mc^2}{\hbar} \psi \tag{A.13}$$

que é a *equação de Dirac*, uma equação matricial onde ψ é um objeto de 4 componentes denominado *espinor de Dirac* cuja representação é da forma de uma matriz coluna, ou seja

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{A.14}$$

Podemos observar que a utilização de índices se faz necessário ao estudarmos a equação de Dirac, o que aumenta o “esforço braçal” ao solucionarmos problemas com a mesma. Sabendo disto, no estudo da teoria relativística e de campos usamos a notação tensorial, que nos dá uma escrita compacta e elegante. As coordenadas espaciais e de tempo, por exemplo, são reunidas em um quadrivetor x^μ onde $\mu = 0, 1, 2, 3$:

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (x^0, x^i) = (x^0, \vec{x}), i = 1, 2, 3 \tag{A.15}$$

com componentes

$$x^0 = ct, \quad x^1 = x, \quad x^2 = y, \quad x^3 = z.$$

As derivadas também podem ser denotadas na forma tensorial, onde

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \tag{A.16}$$

E no decorrer deste trabalho, usaremos a convenção das unidades naturais: $c = \hbar = 1$. Assim, utilizando (A.15) e (A.16), escrevemos (A.13) como

$$i\partial_0\psi = (-i\alpha_1\partial_1 - i\alpha_2\partial_2 - i\alpha_3\partial_3 + \beta m)\psi. \quad (\text{A.17})$$

Podemos compactar (A.17) usando a *notação de Einstein* que consiste em simplificar a escrita com somatórios, ou seja:

$$i\alpha_1\partial_1 + i\alpha_2\partial_2 + i\alpha_3\partial_3 = i\sum_{j=1}^3\alpha_j\partial_j = i\alpha_j\partial_j.$$

Desse modo, temos

$$i\partial_0\psi = (-i\alpha_j\partial_j + \beta m)\psi, \quad (\text{A.18})$$

em que, seu lado direito representa o *Hamiltoniano de Dirac* de uma partícula livre ²

$$\hat{H} = -i\alpha_j\partial_j + \beta m. \quad (\text{A.19})$$

Sendo \hat{H} hermitiano, β e α também são:

$$\beta^\dagger = \beta, \quad \alpha_j^\dagger = \alpha_j. \quad (\text{A.20})$$

Multiplicando (A.18) por β à esquerda, temos

$$i\beta\partial_0\psi = (-i\beta\alpha_j\partial_j + \beta^2 m)\psi, \quad (\text{A.21})$$

onde iremos introduzir a seguinte notação:

$$\beta = \gamma^{(0)}, \quad \beta\alpha_j = \gamma^j. \quad (\text{A.22})$$

Substituindo (A.22) em (A.21) e lembrando de (A.12), temos

$$i\gamma^{(0)}\partial_0\psi = (-i\gamma^j\partial_j + m)\psi \quad (\text{A.23})$$

ou ainda

$$i\gamma^{(0)}\partial_0\psi + i\gamma^j\partial_j\psi - m\psi = 0. \quad (\text{A.24})$$

Lembrando da notação de Einstein, podemos fazer

$$i\gamma^{(0)}\partial_0 + i\gamma^j\partial_j = i\gamma^\mu\partial_\mu$$

e assim, reescrevemos (A.24) da forma

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0 \quad (\text{A.25})$$

onde γ^μ também são chamadas de matrizes de Dirac.

² O lado direito da equação (A.13) também representa o Hamiltoniano de Dirac.

De posse das condições (A.12) e das definições (A.22), chegamos a

$$\begin{aligned} (\gamma^{(0)})^2 &= 1 \\ (\gamma^j)^2 &= -1 \\ \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu &= \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 0, \quad \mu, \nu \neq 0. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Vale ressaltar que em (A.15), nas coordenadas x^μ , usamos uma notação quadrivetorial onde a posição do índice faz diferença: um quadrivetor com índice em cima, x^μ , é contravariante e um quadrivetor com índice embaixo é covariante.

A relação entre x^μ e x_μ é

$$\begin{aligned} x_\mu &= g_{\mu\nu} x^\nu \\ x^\mu &= g^{\mu\nu} x_\nu \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

onde

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.28})$$

é o tensor métrico no espaço de Minkowsky. Ao escrever o somatório $x^\mu x_\mu$ explicitamente, chegamos a

$$x^\mu x_\mu = (x^0)^2 - (\vec{x})^2 \quad (\text{A.29})$$

que é a representação de um intervalo entre dois pontos do espaço-tempo. Podemos ainda representar a energia e o momento de uma partícula pela notação quadrivetorial onde temos o quadrivetor energia-momento:

$$p^\mu = (p^0, p^i), \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.30})$$

Onde $p^0 = p_0 = E$, é a energia relativística que pode ser representada como $(\vec{p} + m^2)$, em que \vec{p} é o momento relativístico. Realizando o somatório $p^\mu p_\mu$, chegamos a

$$p^\mu p_\mu = m^2, \quad (\text{A.31})$$

que representa a energia de uma partícula. Outro somatório interessante é

$$p_\mu x^\mu = p_0 x^0 - \vec{p} \vec{x} \quad (\text{A.32})$$

que aparece na solução da equação de Dirac para o átomo de hidrogênio.

Podemos construir um quadrivetor j^μ , que é a corrente de probabilidade, a partir da função de onda ψ e das matrizes de Dirac γ^μ :

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \psi$$

$$j^\mu = (j^0, j^1, j^2, j^3) = (j^0, j^i) = (j^0, \vec{j}), \quad i = 1, 2, 3$$

onde j^0 é a densidade de probabilidade e $\bar{\Psi} = \psi^\dagger \gamma^{(0)}$ ³. E temos para a densidade de probabilidade j^0 :

$$j^0 = \psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2. \quad (\text{A.33})$$

As matrizes de Dirac têm algumas maneiras de serem representadas, e as três formas principais são:

- **Representação de Dirac**

$$\gamma^{(0)} = \begin{pmatrix} 1_2 & 0_2 \\ 0_2 & -1_2 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.34})$$

- **Representação de Weyl ou representação quirial**

$$\gamma^{(0)} = \begin{pmatrix} 0_2 & 1_2 \\ 1_2 & 0_2 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.35})$$

- **Representação de Majorana**

$$\begin{aligned} \gamma^{(0)} &= \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0_2 \end{pmatrix}, \gamma^{(1)} = i \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0_2 \\ 0_2 & \sigma^3 \end{pmatrix} \\ \gamma^{(2)} &= \begin{pmatrix} 0_2 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0_2 \end{pmatrix}, \gamma^3 = -i \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0_2 \\ 0_2 & \sigma^1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Onde 1_2 é uma matriz identidade 2×2 , 0_2 é uma matriz nula com a mesma dimensão da anterior e σ^i são as matrizes de Pauli⁴.

Cada representação das matrizes de Dirac é aplicada em diferentes contextos, por exemplo, a representação de Dirac é melhor aplicada no limite não relativístico da equação de mesmo nome. Enquanto que a representação de Weyl é utilizada no estudo de fenômenos de quiralidade de férmions⁵. Já a representação de Majorana apresenta as componentes das matrizes γ^μ complexas, porém, os espinores na equação são reais.

³ Onde \dagger é a conjugação hermitiana que implica conjugação complexa (*) das componentes de ψ e sua transposta (\top), ou seja

$$\psi^\dagger = (\psi^*)^\top = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \psi_4^*)$$

⁴ As matrizes de Pauli são matrizes hermitianas de dimensão 2 com traço nulo que estão relacionadas às transformações unitárias das representações dos estados de spin 1/2, mais sobre este assunto vide [Sakurai e Napolitano \(2013\)](#).

⁵ Segundo [Dartora, Jimenez e Zanella \(2015\)](#):

A quiralidade é definida como a propriedade de dois objetos que podem ser convertidos entre si por combinações de translações, rotações e reflexões em planos especiais combinadas, mas não por rotações combinadas a translações somente.

Apesar de serem utilizadas em contextos distintos, podemos relacionar as matrizes de Dirac nas suas diferentes representações por meio de uma transformação unitária que demonstraremos da seguinte forma: um espinor na representação ψ e um espinor na representação $\tilde{\psi}$ são relacionados por uma transformação não singular U , ou seja

$$\tilde{\psi} = U\psi. \quad (\text{A.37})$$

Onde U é uma matriz complexa de dimensão 4 e as propriedades físicas da partícula independem da representação utilizada. Uma particularidade existe no caso da densidade de probabilidade, que é representada pela componente zero do quadrivetor da corrente de probabilidade e, desse modo, necessita satisfazer

$$\tilde{j}^0 = j^0. \quad (\text{A.38})$$

Partindo de (A.33) e (A.38) chegamos a

$$\begin{aligned} j^0 &= \psi^\dagger \psi \\ \tilde{j}^0 &= \tilde{\psi}^\dagger \tilde{\psi} = (U\psi)^\dagger (U\psi) = \psi^\dagger U^\dagger U \psi \end{aligned}$$

$$\psi^\dagger \psi = \psi^\dagger U^\dagger U \psi. \quad (\text{A.39})$$

Para que a igualdade de (A.39) seja válida, é necessário que

$$U^\dagger U = 1, \quad (\text{A.40})$$

ou seja, U é unitária.

A equação de Dirac para $\tilde{\psi}$ tem a forma

$$(i\tilde{\gamma}\partial_\mu - m)\tilde{\psi} = 0, \quad (\text{A.41})$$

sendo $\tilde{\gamma}$ as matrizes de Dirac nesta representação. Agora vamos mostrar qual a relação das matrizes de Dirac nas diferentes representações e o que isso implica. Tomando (A.37) e (A.40) escrevemos

$$\psi = U^\dagger \tilde{\psi}. \quad (\text{A.42})$$

Substituindo (A.42) em (A.25),

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)U^\dagger \tilde{\psi} = 0$$

$$i\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu \tilde{\psi} - mU^\dagger \tilde{\psi} = 0$$

e multiplicando por U á esquerda

$$iU\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu \tilde{\psi} - mUU^\dagger \tilde{\psi} = 0$$

$$iU\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu \tilde{\psi} - m\tilde{\psi} = 0$$

$$(iU\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu - m) \tilde{\psi} = 0. \quad (\text{A.43})$$

Comparando (A.43) com (A.41) chegamos a

$$(i\tilde{\gamma}\partial_\mu - m) \tilde{\psi} = (iU\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu - m) \tilde{\psi}$$

$$i\tilde{\gamma}\partial_\mu = iU\gamma^\mu U^\dagger \partial_\mu$$

$$\tilde{\gamma} = U\gamma^\mu U^\dagger. \quad (\text{A.44})$$

Vamos demonstrar ainda que as matrizes $\tilde{\gamma}^\mu$ possuem as mesmas propriedades das matrizes γ^μ (A.26), ou seja

$$(\tilde{\gamma}^\mu)^2 = (U\gamma^\mu U^\dagger) (U\gamma^\mu U^\dagger)$$

$$(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 = (U\gamma^{(0)} U^\dagger) (U\gamma^{(0)} U^\dagger)$$

$$(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 = U\gamma^{(0)} U^\dagger U\gamma^{(0)} U^\dagger$$

$$(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 = U \underbrace{(\gamma^{(0)})^2}_1 U^\dagger$$

$$(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 = UU^\dagger$$

$$(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 = 1.$$

$$(\tilde{\gamma}^i)^2 = (U\gamma^i U^\dagger) (U\gamma^i U^\dagger)$$

$$(\tilde{\gamma}^i)^2 = U\gamma^i U^\dagger U\gamma^i U^\dagger$$

$$(\tilde{\gamma}^i)^2 = U \underbrace{(\gamma^i)^2}_{-1} U^\dagger$$

$$(\tilde{\gamma}^i)^2 = -1.$$

Se $\mu \neq \nu$

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = \tilde{\gamma}^\mu \tilde{\gamma}^\nu + \tilde{\gamma}^\nu \tilde{\gamma}^\mu$$

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = (U\gamma^\mu U^\dagger) (U\gamma^\nu U^\dagger) + (U\gamma^\nu U^\dagger) (U\gamma^\mu U^\dagger)$$

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = U\gamma^\mu U^\dagger U\gamma^\nu U^\dagger + U\gamma^\nu U^\dagger U\gamma^\mu U^\dagger$$

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = U\gamma^\mu \gamma^\nu U^\dagger + U\gamma^\nu \gamma^\mu U^\dagger$$

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = U(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) U^\dagger$$

$$\begin{aligned}\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} &= U \underbrace{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}}_0 U^\dagger \\ \{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} &= 0.\end{aligned}$$

Logo:

$$\begin{aligned}(\tilde{\gamma}^{(0)})^2 &= 1 \\ (\tilde{\gamma}^i)^2 &= -1 \\ \tilde{\gamma}^\mu \tilde{\gamma}^\nu + \tilde{\gamma}^\nu \tilde{\gamma}^\mu &= \{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = 0, \quad \mu, \nu \neq 0.\end{aligned}\tag{A.45}$$

Outras relações para diferentes representações que podemos demonstrar são com as matrizes β e α_i . Usamos (A.42) para γ^μ e chegamos a

$$\begin{aligned}\tilde{\beta} &= \gamma^{(0)} \\ \tilde{\beta} &= U \underbrace{\gamma^{(0)}}_\beta U^\dagger \\ \tilde{\beta} &= U\beta U^\dagger.\end{aligned}$$

Temos também

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_i &= \gamma^{(0)} \tilde{\gamma}^i \\ \tilde{\alpha}_i &= (U\gamma^{(0)}U^\dagger) (U\tilde{\gamma}^i U^\dagger) \\ \tilde{\alpha}_i &= U\gamma^{(0)} \underbrace{U^\dagger U}_1 \tilde{\gamma}^i U^\dagger \\ \tilde{\alpha}_i &= U \underbrace{\gamma^{(0)} \tilde{\gamma}^i}_{\alpha_i} U^\dagger \\ \tilde{\alpha}_i &= U\alpha_i U^\dagger.\end{aligned}\tag{A.46}$$

Aplicando (A.19) em uma função de onda ψ temos

$$\hat{H}\psi = (-i\alpha_j \partial_j + \beta m)\psi = \varepsilon\psi,\tag{A.47}$$

onde ε é constante e representa a energia cujo valor pode ser positivo ($\varepsilon = \varepsilon_+ = p_0 > 0$) para partículas ou negativo ($\varepsilon = \varepsilon_- = -p_0 < 0$) para antipartículas. No caso das partículas (antipartículas) sem massa, ou seja, $m = 0$, a equação (A.47) reduz-se à equação (2.19).

No caso da função de onda para a partícula livre, a equação (A.18) é reescrita da forma

$$i\partial_0\psi = \varepsilon\psi,\tag{A.48}$$

cuja solução para partículas é

$$\psi_+(x^\mu) = e^{-ip_0 x^0} \psi_+(x^i),\tag{A.49}$$

e para antipartículas

$$\psi_-(x^\mu) = e^{ip_0 x^0} \psi_-(x^i).\tag{A.50}$$

A.2 Equação de Dirac no espaço curvo

O ponto de partida para construirmos a equação de Dirac no espaço curvo é o estudo do grupo de Lorentz. Para isso, vamos fazer uso do trabalho de Santos (2015) que detalha sobre o tema além de construir sucintamente a equação de Dirac no espaço curvo. Desse modo, omitiremos a citação deste ao longo do texto, salvo citação diferente.

Iniciamos então pela compreensão do grupo de Lorentz a partir da diferença entre as transformações de Galileu e Lorentz ⁶: na mecânica clássica não relativística, a distância $d^2 = x^2 + y^2 + z^2$ é invariante em referenciais com velocidade constante. Para conectar referenciais inerciais, utilizamos as transformações de Galileu expressas pelas equações (MACHADO, 2002)

$$x' = x - v_x t \quad (\text{A.51})$$

$$y' = y - v_y t \quad (\text{A.52})$$

$$z' = z - v_z t \quad (\text{A.53})$$

$$t' = t. \quad (\text{A.54})$$

Onde (x', y', z') e (x, y, z) são coordenadas dos referenciais S' e S , respectivamente. Além disso, $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ representa o vetor velocidade do referencial S' que se move com relação a S .

Para o cenário relativístico, onde levamos em conta a constância da velocidade da luz, temos as transformações de Lorentz, que preservam a quantidade $t^2 - x^2 - y^2 - z^2$ e formam o grupo de Lorentz que está ligado às simetrias da Relatividade Restrita.

A.2.1 Grupo de Lorentz

Sejam as coordenadas do espaço-tempo x^α e as coordenadas transformadas x'^α . Podemos conectá-las a partir de uma transformação de Lorentz na forma

$$x'^\alpha = \Lambda_\beta^\alpha x^\beta + a^\alpha, \quad (\text{A.55})$$

onde Λ_β^α e a^α são quantidades constantes. Essa transformação tem que manter a quantidade $t'^2 - x'^2 - y'^2 - z'^2$ invariante para que as teorias da Relatividade Restrita sejam obedecidas.

O elemento de distância na forma infinitesimal é escrito como

$$ds'^2 = dt'^2 - dx'^2 - dy'^2 - dz'^2 \quad (\text{A.56})$$

ou, no formalismo tensorial

$$ds'^2 = \eta_{\alpha\beta} dx'^\alpha dx'^\beta \quad (\text{A.57})$$

⁶ Para uma leitura mais aprofundada e didática, vide Rocha, Rizzuti e Mota (2013)

onde

$$\eta_{\alpha\beta} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (\text{A.58})$$

Fazendo uso de (A.55) em (A.57) temos

$$ds'^2 = \eta_{\alpha\beta} (\Lambda_\gamma^\alpha dx^\gamma) (\Lambda_\delta^\beta dx^\delta)$$

$$ds'^2 = \eta_{\alpha\beta} \Lambda_\gamma^\alpha \Lambda_\delta^\beta dx^\gamma dx^\delta \quad (\text{A.59})$$

e comparando (A.59) com (A.57) chegamos a

$$\eta_{\alpha\beta} \Lambda_\gamma^\alpha \Lambda_\delta^\beta dx^\gamma dx^\delta = \eta_{\gamma\delta} dx'^\gamma dx'^\delta.$$

Se

$$\eta_{\alpha\beta} \Lambda_\gamma^\alpha \Lambda_\delta^\beta = \eta_{\gamma\delta} \quad (\text{A.60})$$

temos

$$\eta_{\gamma\delta} dx^\gamma dx^\delta = \eta_{\gamma\delta} dx'^\gamma dx'^\delta \quad (\text{A.61})$$

e lembrando de (A.57)

$$ds^2 = ds'^2. \quad (\text{A.62})$$

O resultado (A.62) corrobora com o que já tratamos no início da seção, ou seja, a transformação de Lorentz deve manter a invariância do elemento de distância para os referenciais inerciais S e S' . Podemos ainda representar uma transformação de Lorentz de forma geral para uma quantidade ψ_n de modo que

$$\psi'_n = \sum_m [D(\Lambda)]_{nm} \psi_m, \quad (\text{A.63})$$

sendo $D(\Lambda)$ uma representação matricial do grupo de Lorentz.

Se tivermos uma transformação Λ_1 seguida de uma transformação Λ_2 então, podemos expressar isso como $\Lambda_1 \Lambda_2$. Assim, uma das propriedades dessa transformação é que transformações seguidas são equivalentes à uma única transformação. Partindo disso, as matrizes $D(\Lambda)$ devem satisfazer

$$D(\Lambda_1) D(\Lambda_2) = D(\Lambda_1 \Lambda_2) \quad (\text{A.64})$$

Um exemplo de aplicação da transformação (A.64) é se ψ_n for um vetor contravariante V^α , sendo $D(\Lambda)$ escrito como

$$[D(\Lambda)]_\beta^\alpha = \Lambda_\beta^\alpha, \quad (\text{A.65})$$

assim

$$V^\alpha = \Lambda_\beta^\alpha V^\beta. \quad (\text{A.66})$$

No caso de um tensor contravariante de segunda ordem $T^{\alpha\beta}$, $D(\Lambda)$ torna-se

$$[D(\Lambda)]_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} = \Lambda_{\gamma}^{\alpha}\Lambda_{\delta}^{\beta}, \quad (\text{A.67})$$

cuja transformação é

$$T'^{\alpha\beta} = \Lambda_{\gamma}^{\alpha}\Lambda_{\delta}^{\beta}T^{\gamma\delta}. \quad (\text{A.68})$$

Vimos então que (A.65) e (A.67) são exemplos de representação tensorial do grupo de Lorentz.

Para os espinores, necessitaremos de uma representação espinorial do grupo de Lorentz que é construído a partir da forma infinitesimal da transformação

$$\Lambda_{\beta}^{\alpha} = \delta_{\beta}^{\alpha} + \omega_{\beta}^{\alpha} \quad (\text{A.69})$$

onde δ_{β}^{α} é um tensor que preserva as quantidades transformadas e ω_{β}^{α} é uma quantidade infinitesimal cujo módulo é $|\omega_{\beta}^{\alpha}| \ll 1$.

Sendo (A.69) uma transformação de Lorentz, a mesma deve satisfazer (A.60). E desse modo, temos

$$\begin{aligned} \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\alpha\beta} (\delta_{\gamma}^{\alpha} + \omega_{\gamma}^{\alpha}) (\delta_{\delta}^{\beta} + \omega_{\delta}^{\beta}) \\ \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\alpha\beta} (\delta_{\gamma}^{\alpha}\delta_{\delta}^{\beta} + \delta_{\gamma}^{\alpha}\omega_{\delta}^{\beta} + \omega_{\gamma}^{\alpha}\delta_{\delta}^{\beta} + \omega_{\gamma}^{\alpha}\omega_{\delta}^{\beta}) \\ \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma}^{\alpha}\delta_{\delta}^{\beta} + \eta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma}^{\alpha}\omega_{\delta}^{\beta} + \eta_{\alpha\beta}\omega_{\gamma}^{\alpha}\delta_{\delta}^{\beta} + \eta_{\alpha\beta}\omega_{\gamma}^{\alpha}\omega_{\delta}^{\beta} \\ \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\gamma\delta} + \eta_{\gamma\beta}\omega_{\delta}^{\beta} + \eta_{\alpha\delta}\omega_{\gamma}^{\alpha} + \eta_{\alpha\beta}\omega_{\gamma}^{\alpha}\omega_{\delta}^{\beta}. \end{aligned}$$

Onde o último termo será descartado por ser de alta ordem. E assim,

$$\begin{aligned} \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\gamma\delta} + \eta_{\gamma\beta}\omega_{\delta}^{\beta} + \eta_{\alpha\delta}\omega_{\gamma}^{\alpha} \\ \eta_{\gamma\delta} &= \eta_{\gamma\delta} + \omega_{\gamma\delta} + \omega_{\delta\gamma} \\ \eta_{\gamma\delta} + \omega_{\gamma\delta} + \omega_{\delta\gamma} &= \eta_{\gamma\delta} \\ \omega_{\gamma\delta} + \omega_{\delta\gamma} &= \eta_{\gamma\delta} - \eta_{\gamma\delta} \\ \omega_{\gamma\delta} + \omega_{\delta\gamma} &= 0 \\ \omega_{\gamma\delta} &= -\omega_{\delta\gamma}. \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

Verificamos assim, a antissimetria em (A.70). E tal propriedade deve ser válida também para as matrizes $D(\Lambda)$, ou seja, impondo a expansão

$$D(1 + \omega) = 1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta} \quad (\text{A.71})$$

temos

$$\sigma_{\gamma\delta} = -\sigma_{\delta\gamma}. \quad (\text{A.72})$$

O termo $\sigma_{\delta\gamma}$ também possui propriedade anticomutativa, para verificar isso, vamos utilizar (A.64) para a quantidade $\Lambda(1 + \omega)\Lambda^{-1}$

$$\begin{aligned} D(\Lambda)D(1 + \omega)D(\Lambda^{-1}) &= D[\Lambda(1 + \omega)\Lambda^{-1}] \\ D(\Lambda)D(1 + \omega)D(\Lambda^{-1}) &= D(\Lambda\Lambda^{-1} + \Lambda\omega\Lambda^{-1}) \\ D(\Lambda)D(1 + \omega)D(\Lambda^{-1}) &= D(1 + \Lambda\omega\Lambda^{-1}). \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

Substituindo (A.71) em (A.73)

$$\begin{aligned} D(\Lambda)\left(1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\right)D(\Lambda^{-1}) &= D(1 + \Lambda\omega\Lambda^{-1}) \\ D(\Lambda)\left(1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\right)D(\Lambda^{-1}) &= D(1 + \Lambda\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda^{-1}) \\ D(\Lambda)\left(1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\right)D(\Lambda^{-1}) &= 1 + \frac{1}{2}\Lambda\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda^{-1} \\ D(\Lambda)\left(1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\right)D(\Lambda^{-1}) &= 1 + \frac{1}{2}\omega^{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda_{\alpha}^{\gamma}\Lambda_{\beta}^{\delta} \\ D(\Lambda)D(\Lambda^{-1}) + D(\Lambda)\frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}D(\Lambda^{-1}) &= 1 + \frac{1}{2}\omega^{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda_{\alpha}^{\gamma}\Lambda_{\beta}^{\delta} \\ 1 + D(\Lambda)\frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}D(\Lambda^{-1}) &= 1 + \frac{1}{2}\omega^{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda_{\alpha}^{\gamma}\Lambda_{\beta}^{\delta} \\ D(\Lambda)\frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}D(\Lambda^{-1}) &= \frac{1}{2}\omega^{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}\Lambda_{\alpha}^{\gamma}\Lambda_{\beta}^{\delta} \\ D(\Lambda)\sigma_{\gamma\delta}D(\Lambda^{-1}) &= \sigma_{\gamma\delta}\Lambda_{\alpha}^{\gamma}\Lambda_{\beta}^{\delta}. \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

Fazendo

$$\Lambda = 1 + \omega \quad (\text{A.75})$$

$$\Lambda^{-1} = 1 - \omega \quad (\text{A.76})$$

e substituindo em (A.69), (A.75) e (A.76) em (A.74), temos

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\right)\sigma_{\alpha\beta}\left(1 - \frac{1}{2}\omega^{\epsilon\rho}\sigma_{\epsilon\rho}\right) &= \sigma_{\gamma\delta}(\delta_{\alpha}^{\gamma} + \omega_{\alpha}^{\gamma})(\delta_{\beta}^{\delta} + \omega_{\beta}^{\delta}) \\ \sigma_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}\omega^{\epsilon\rho}\sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\epsilon\rho} + \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}\sigma_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\beta} - \frac{1}{4}\omega^{\gamma\delta}\omega^{\epsilon\rho}\sigma_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\epsilon\rho} &= \sigma_{\gamma\delta}(\delta_{\alpha}^{\gamma}\delta_{\beta}^{\delta} + \delta_{\alpha}^{\gamma}\omega_{\beta}^{\delta} + \omega_{\alpha}^{\gamma}\delta_{\beta}^{\delta} + \omega_{\alpha}^{\gamma}\omega_{\beta}^{\delta}). \end{aligned}$$

Realizando algumas manipulações de índices e algébricas chegamos a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\omega^{\gamma\delta}(\sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} - \sigma_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\beta}) &= \omega^{\gamma\delta}(\eta_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\delta} + \eta_{\gamma\delta}\sigma_{\delta\beta}) \\ \sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} - \sigma_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\beta} &= 2\eta_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\delta} + 2\eta_{\gamma\delta}\sigma_{\delta\beta}. \end{aligned}$$

Fazendo manipulações com os índices novamente, temos

$$[\sigma_{\alpha\beta}, \sigma_{\gamma\delta}] = \eta_{\gamma\delta}\sigma_{\alpha\delta} - \eta_{\gamma\alpha}\sigma_{\beta\delta} + \eta_{\delta\beta}\sigma_{\gamma\alpha} - \eta_{\delta\alpha}\sigma_{\gamma\beta}. \quad (\text{A.77})$$

Onde (A.77) é a relação de comutação que σ deve satisfazer. Desse modo, para encontrar uma representação do grupo de Lorentz é necessário encontrar quantidades que satisfaçam (A.77).

A.2.2 Formalismo das t etras

Al em do estudo sobre o grupo de Lorentz para a determina  o da equa  o de Dirac no espa o curvo, precisamos dominar a estrutura matem tica da teoria de campo de *vierbein* que engloba o formalismo das t etras.⁷ A teoria de campo de *vierbein* foi proposta por Einstein em 1928 em dois trabalhos publicados sucessivamente em um intervalo de uma semana (YEPEZ, 2008; EINSTEIN, 1928a; EINSTEIN, 1928b).

No primeiro trabalho (EINSTEIN, 1928b),   adicionado o conceito de paralelismo distante   teoria de variedades curvas de Riemann, em que   introduzido a raiz quadrada do tensor m trico e a partir disso, observa-se uma equival ncia com a equa  o de Dirac, cujo diferencial foi introduzir uma raiz quadrada na equa  o de Klein-Gordon (DIRAC, 1928). Assim, verificou-se a possibilidade de escrever a equa  o de Dirac em espa os curvos, utilizando a teoria de campo de *vierbein*. Em seu segundo trabalho (EINSTEIN, 1928a), Einstein tenta unificar a gravidade e o eletromagnetismo de forma simples e intuitiva, por m, sem atingir completamente o seu objetivo (YEPEZ, 2008).

A estrutura matem tica da teoria de campo de *vierbein* ser  apresentada tendo como refer ncia o trabalho de Yepez (2008). Primeiramente, apresentamos a base diferencial “natural” para o espa o tangente T_p em um ponto p dado pelas derivadas parciais das coordenadas nesse ponto

$$\hat{\mathbf{e}}_{(\mu)} = \partial_{(\mu)}. \quad (\text{A.78})$$

Para um quadrivetor $A \in T_p$, podemos escrev -lo em componentes na forma

$$A = A^\mu \hat{\mathbf{e}}_{(\mu)} = (A_0, A_1, A_2, A_3) \quad (\text{A.79})$$

onde μ representa um componente em um dado sistema de coordenadas e A^μ   um componente de um vetor contravariante.

Existe tamb m um espa o dual (denominado espa o cotangente) T_p^* que   medido pelos elementos diferenciais

$$\hat{\mathbf{e}}^{(\mu)} = d\mathbf{x}^{(\mu)} \quad (\text{A.80})$$

e cujo quadrivetor $A \in T_p^*$ em componentes   escrito como

$$A = A_\mu \hat{\mathbf{e}}^{(\mu)} = g_{\mu\nu} A^\nu e^{(\mu)}, \quad (\text{A.81})$$

onde A_μ   um componente de um vetor covariante (tamb m denominado vetor dual ou *1-forma*) e $g_{\mu\nu}$ o tensor m trico relacionado   uma espa o-tempo de geometria arbitr ria.

Por (A.79) e (A.81), podemos concluir que

$$\hat{\mathbf{e}}^{(\mu)} \otimes \hat{\mathbf{e}}_{(\nu)} = \mathbf{1}_\nu^\mu, \quad (\text{A.82})$$

⁷ Embora a maioria da literatura considere os termos *vierbein* e t trada sin nimos, faremos distin  o entre os mesmos denotando $\hat{\mathbf{e}}_{(a)}$ como um elemento da base t trada e e^μ para *vierbein*. (YEPEZ, 2008)

ou seja, há uma relação de ortonormalidade entre as duas bases, em que $\mathbf{1}$ é a identidade.

Sendo o espaço tangente (e conseqüentemente o cotangente) um espaço generalizado, somos livres para escolher qualquer base ortonormal para abrangê-lo. Desse modo, denotamos um conjunto de vetores de base unitários generalizado por $\hat{\mathbf{e}}_{(a)}$, sendo os índices latinos a representação de uma base independente da coordenada. A partir disso, o produto interno é expresso como

$$\left(\hat{\mathbf{e}}_{(a)}, \hat{\mathbf{e}}_{(b)}\right) = \eta_{ab}, \quad (\text{A.83})$$

sendo $\eta_{ab} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ a métrica de Minkowski no espaço-tempo plano.

A base não coordenada $\hat{\mathbf{e}}_{(a)}$ é denominada de base tétrada que tem como característica principal a independência da posição e maior abrangência ao caracterizar espaços curvos, por exemplo. Isso permite escrevermos quaisquer vetores como uma combinação linear destas bases em um dado ponto sem a necessidade de recorrer à geometria do espaço abordado.

Um elemento da base tétrada é expresso como $\hat{\mathbf{e}}_{(a)}$ e podemos escrever uma base dependente de uma coordenada em um dado ponto x em termos da combinação linear da base tétrada, ou seja

$$\hat{\mathbf{e}}_{(\mu)}(x) = e_{\mu}^{(a)} \hat{\mathbf{e}}_{(a)} \quad (\text{A.84})$$

onde $e_{\mu}^{(a)}$ é uma matriz 4×4 invertível.

Logo, o termo campo de *vierbein* é aplicado em matrizes invertíveis com 16 elementos, onde $a = 1, 2, 3, 4$, por significar quatro “pernas”, ou seja, abrange todas as dimensões. O inverso desta matriz tem componentes $e_{(a)}^{\mu}$ e satisfazem as seguintes condições de ortonormalidade

$$\begin{aligned} e_{\mu}^{(a)}(x) e_{\nu}^a(x) &= \delta_{\nu}^{\mu} \\ e_{\mu}^{(a)}(x) e_{\nu}^b(x) &= \delta_a^b. \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

Podemos também escrever a base tétrada em termos de uma combinação linear da base de coordenadas utilizando a matriz inversa *vierbein*, (A.85),

$$\hat{\mathbf{e}}_{(a)} = e_{\mu}^{(a)}(x) \hat{\mathbf{e}}_{(\mu)}. \quad (\text{A.86})$$

Além disso, temos a relação

$$e_{\mu(a)}(x) e_b^{\nu}(x) = \eta_{ab}. \quad (\text{A.87})$$

Ao empregarmos a métrica $g_{\mu\nu}$ em (A.87) chegamos a

$$g_{\mu\nu}(x) e_a^{\mu}(x) e_b^{\nu}(x) = \eta_{ab} \quad (\text{A.88})$$

e, usando as relações (A.85) em (A.88) temos

$$g_{\mu\nu}(x) = e_{\mu}^{(a)}(x) e_{\nu}^b(x) \eta_{ab}. \quad (\text{A.89})$$

A equação (A.89) nos permite concluir que o campo *vierbein* é a raiz quadrada da métrica.

Em se tratando do espaço cotangente T_p^* , podemos formar uma base ortonormal dual $\widehat{\mathbf{e}}^{(a)}$ que satisfaz a relação tensorial

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(a)} \otimes \widehat{\mathbf{e}}_{(b)} = \mathbf{1}_b^a. \quad (\text{A.90})$$

Tal base não coordenada 1-forma pode ser escrita como uma combinação linear da base 1-forma de coordenadas, ou seja

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(a)} = e_\mu^{(a)}(x) \widehat{\mathbf{e}}^{(\mu)}(x), \quad (\text{A.91})$$

onde $\widehat{\mathbf{e}}^{(\mu)}(x) = dx^\mu$. O inverso também pode ocorrer, ou seja, podemos escrever a base de coordenadas 1-forma como uma combinação linear da base 1-forma não coordenada

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(\mu)}(x) = e_{(a)}^\mu(x) \widehat{\mathbf{e}}^{(a)}. \quad (\text{A.92})$$

As equações vistas na presente seção nos dá uma liberdade de escrever qualquer vetor do espaço-tempo em termos da base coordenada ou não coordenada, ou seja

$$\mathbf{V} = V^\mu \widehat{\mathbf{e}}_{(\mu)} = V^{(a)} \widehat{\mathbf{e}}_{(a)}. \quad (\text{A.93})$$

Logo, as componentes deste vetor se relacionam pela transformação do campo de *vierbein*

$$\begin{aligned} V^a &= e_\mu^{(a)} V^\mu \\ V^\mu &= e_a^\mu V^a. \end{aligned} \quad (\text{A.94})$$

A.2.2.1 Conexões

A teoria da Relatividade Geral afirma que a matéria e a energia ocasionam uma curvatura na geometria do espaço-tempo. Para medir tal curvatura, utilizamos o tensor de Riemann onde o ponto de partida é tomar um vetor em algum ponto e transportá-lo em paralelo ao longo de uma curva no espaço-tempo.

Como exemplo, seja um campo tensorial A^μ que é função das coordenadas x^μ . Se considerarmos dois pontos infinitesimalmente próximos, supomos que o campo se altera na forma (AMORIM et al., 2015)

$$\bar{\delta} A^\mu = -\Gamma_{\nu\lambda}^\mu A^\nu dx^\lambda, \quad (\text{A.95})$$

sob transporte paralelo como mostra a Fig. 18. Onde $\Gamma_{\nu\lambda}^\mu A^\nu$ é denominado conexão afim. Tal termo permite gerar um tensor paralelo ao tensor antes do deslocamento por meio de uma combinação linear do campo tensorial e do diferencial das coordenadas.

Além disso, segundo Amorim et al. (2015), existe uma outra alteração no campo: uma alteração diferencial expressa como

$$dA^\mu = \frac{\partial A^\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu \quad (\text{A.96})$$

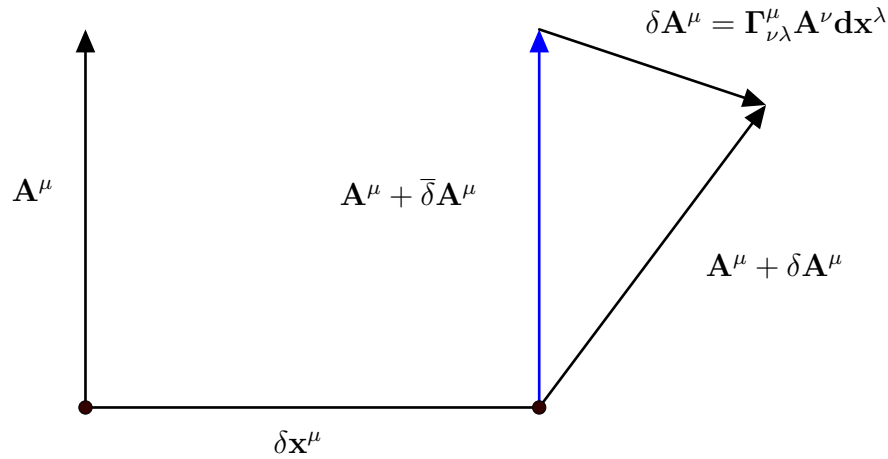


Figura 18 – O tensor A^μ é transportado num espaço com curvatura, porém, o tensor transportado $A^\mu + \delta A^\mu$ não é paralelo a A^μ . Logo, por meio da conexão afim $\Gamma_{\nu\lambda}^\mu$, gera-se um tensor paralelo a A^μ definido como $A^\mu + \bar{\delta} A^\mu$ como se estivéssemos num espaço plano, onde $\bar{\delta} A^\mu = \Gamma_{\nu\lambda}^\mu A^\nu dx^\lambda$.

que de uma maneira total é escrito

$$\begin{aligned}
 DA^\mu &= dA^\mu - \delta A^\mu \\
 DA^\mu &= \underbrace{\left(\frac{\partial A^\mu}{\partial x^\nu} + \Gamma_{\lambda\nu}^\mu A^\lambda \right)}_{\nabla_\nu A^\mu} dx^\nu \\
 DA^\mu &= \nabla_\nu A^\mu dx^\nu. \tag{A.97}
 \end{aligned}$$

Segundo [Amorim et al. \(2015\)](#), a notação da equação (A.97) nos possibilita definir uma nova derivada que se transforma como um tensor sendo suas componentes expressas como $\nabla_\nu A^\mu$ conhecida como derivada covariante. A transformação em tensor se dá por meio de uma combinação da derivada parcial com o termo de correção (conexão afim). Ressaltando que a utilização desse termo se dá na geometria diferencial baseada em coordenadas. ([YEPEZ, 2008](#); [AMORIM et al., 2015](#))

No caso de uma geometria diferencial não baseada em coordenadas, o termo de conexão afim é substituído pelo termo de conexão *spin*, $\omega_{\mu b}^a$, cuja função é obter derivadas covariantes de espinores. Os índices latinos, que representam a base independente das coordenadas, recebem um fator de correção que é a conexão de spin contraída com o tensor, ou seja

$$\nabla_\nu A_a^b = \partial_\nu A_a^b + \omega_{\mu c}^a A_b^c - \omega_{\mu b}^c A_c^a. \tag{A.98}$$

Onde, a correção é positiva para um índice superior e negativa para um índice inferior (YEPEZ, 2008). Os termos de conexão afim e de spin podem ser relacionados pelas expressões

$$\Gamma_{\mu\lambda}^\nu = e_a^\nu \partial_\mu e_\lambda^a + e_a^\nu e_\lambda^b \omega_{\mu b}^a \quad (\text{A.99})$$

$$\omega_{\mu b}^a = e_\nu^a e_a^\lambda \Gamma_{\mu\lambda}^\nu - e_b^\lambda \partial_\mu e_\lambda^a. \quad (\text{A.100})$$

A.2.2.2 Postulado das tetradas

Ao multiplicarmos (A.100) por e_ν^b temos

$$\omega_{\mu b}^a e_\nu^b = e_\sigma^a \Gamma_{\mu\nu}^\sigma - \partial_\mu e_\nu^a \quad (\text{A.101})$$

ou

$$\partial_\mu e_\nu^a - e_\sigma^a \Gamma_{\mu\nu}^\sigma + \omega_{\mu b}^a e_\nu^b = 0. \quad (\text{A.102})$$

A expressão (A.100) nada mais é que uma derivada covariante do campo *vierbein* $\nabla_\mu e_\nu^a$, desse modo, temos o postulado da tetrada

$$\nabla_\mu e_\nu^a = 0 \quad (\text{A.103})$$

onde, a derivada covariante do campo *vierbein* desaparece.

Para melhor compreensão deste postulado, vamos lembrar de como as derivadas covariantes de bases coordenadas e não coordenadas são escritas para um tensor X e o 1-forma, respectivamente, ou seja

$$\nabla_\mu X^\nu = d_\mu X^\nu + \Gamma_{\mu\lambda}^\nu X^\lambda \quad (\text{A.104a})$$

$$\nabla_\mu X_\nu = d_\mu X_\nu - \Gamma_{\mu\nu}^\lambda X_\lambda \quad (\text{A.104b})$$

$$\nabla_\mu X^a = d_\mu X^a + \omega_{\mu b}^a X^b \quad (\text{A.104c})$$

$$\nabla_\mu X_a = d_\mu X_a - \omega_{\mu a}^b X_b. \quad (\text{A.104d})$$

Tomando (A.104c) e exigindo que seja invariante de Lorentz

$$\begin{aligned} \Lambda_a^{a'} : \nabla_\mu X^a &\rightarrow \nabla_\mu (\Lambda_a^{a'} X^a) \\ \nabla_\mu (\Lambda_a^{a'} X^a) &= (\nabla_\mu \Lambda_a^{a'}) X^a + \Lambda_a^{a'} \nabla_\mu X^a \end{aligned}$$

onde

$$\nabla_\mu (\Lambda_a^{a'} X^a) = \Lambda_a^{a'} \nabla_\mu X^a \quad (\text{A.105})$$

se

$$\left(\nabla_{\mu}\Lambda_a^{a'}\right) = 0 \quad (\text{A.106})$$

ou seja, a derivada covariante $\nabla_{\mu}X^a$ é invariante de Lorentz se a exigência (A.106) for cumprida.

Além deste postulado, usando a notação de Cartan (CARTAN, 1923), a base 1-forma não coordenada (A.92) pode ser escrita como (YEPEZ, 2008)

$$e^a \equiv \hat{e}^{(a)} = e_{\mu}^{(a)} dx^{\mu}. \quad (\text{A.107})$$

O termo de conexão de spin 1-forma é

$$\omega_b^a = \omega_{\mu b}^a dx^{\mu}. \quad (\text{A.108})$$

É também convencional definir uma forma diferencial (YEPEZ, 2008)

$$dA \equiv \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} \quad (\text{A.109})$$

e o produto cunha (exterior) como

$$A \wedge B \equiv A_{\mu}B_{\nu} - A_{\nu}B_{\mu}. \quad (\text{A.110})$$

A.2.3 Equação de Dirac no espaço curvo

No espaço-tempo curvo, desejamos manter a característica fundamental da equação de Dirac que é a invariância sob transformações de Lorentz. Para isso, utilizamos o formalismo das tetradas visto na subseção anterior. Lembrando que

$$g_{\mu\nu} = e_{\mu}^{(a)}e_{\nu}^{(b)}\eta_{(a)(b)} \quad (\text{A.111})$$

onde $\eta_{(a)(b)} \rightarrow$ tensor de Minkowski que representa a métrica num espaço-tempo sem curvatura; $g_{\mu\nu} \rightarrow$ tensor métrico relacionado á um espaço-tempo de geometria arbitrária. E também

$$V_{\mu} = e_{\mu}^{(a)}V(a) \quad (\text{A.112})$$

cuja utilização será feita para relacionar a forma de um vetor nas diferentes curvas do espaço-tempo.

Para chegarmos á equação de Dirac no espaço curvo, vamos tomar posse de um espinor transformado

$$\psi \rightarrow \rho(\Lambda)\psi \quad (\text{A.113})$$

onde

$$\rho(\Lambda) = 1 + \frac{1}{2}i\epsilon^{(a)(b)}\Sigma_{(a)(b)} \quad (\text{A.114})$$

sendo

$\Sigma_{(a)(b)} \rightarrow$ representação espinorial dos geradores de transformação de Lorentz em

$$\Sigma_{(a)(b)} = \frac{1}{4}i [\gamma^{(a)}, \gamma^{(b)}]. \quad (\text{A.115})$$

Após isso, devemos construir uma derivada covariante que é localmente invariante de Lorentz. Ou seja, devemos impor a condição

$$\nabla_{(a)}\psi \rightarrow \rho\Lambda_{(a)(b)}\nabla_{(b)}\psi \quad (\text{A.116})$$

e supor a seguinte combinação

$$\nabla_{(a)}\psi = e_{(a)}^\mu (\partial_\mu + \Omega_\mu)\psi, \quad (\text{A.117})$$

cuja transformação de Ω_μ se dá por

$$\Omega_\mu \rightarrow \rho\Omega_\mu\rho^{-1} + \partial_\mu\rho\rho^{-1}. \quad (\text{A.118})$$

Escolhendo uma combinação de termos na forma

$$\Omega_\mu \equiv \frac{1}{2}i\Gamma_\mu^{(a)(b)}\Sigma_{(a)(b)} = \frac{1}{2}ie_\nu^{(a)}\nabla_\mu e^{(b)\nu}\Sigma_{(a)(b)} \quad (\text{A.119})$$

onde

$$\Gamma_\mu^{(a)(b)} = e_\nu^{(a)}\nabla_\mu e^{(b)\nu}. \quad (\text{A.120})$$

Reescrevendo a equação de Dirac no espaço plano (A.25) pelo formalismo das tetradas com a derivada covariante temos

$$i\gamma^{(a)}\nabla_{(a)}\psi - m\psi = 0 \quad (\text{A.121})$$

e substituindo (A.117) em (A.121) chegamos a

$$ie_{(a)}^\mu\gamma^{(a)}(\partial_\mu + \Omega_\mu)\psi - m\psi = 0$$

$$\left[ie_{(a)}^\mu\gamma^{(a)}(\partial_\mu + \Omega_\mu) - m\right]\psi = 0, \quad (\text{A.122})$$

que é a equação de Dirac no espaço curvo. Podemos compactar (A.122) sabendo que

$$\gamma^\mu = e_{(a)}^\mu\gamma^{(a)} \quad \text{e} \quad (\text{A.123a})$$

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Omega_\mu. \quad (\text{A.123b})$$

Logo,

$$[i\gamma^\mu\nabla_\mu - m]\psi = 0. \quad (\text{A.124})$$

APÊNDICE B

MÉTODO DE NUMEROV

O algoritmo de Numerov foi desenvolvido por Boris Vasilyevich Numerov, para uma classe especial de equações diferenciais que se apresentam na forma

$$y''(x) + k(x)y(x) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Observamos em (B.1) que não temos o termo de primeira derivada. Esse tipo de equação é comumente vista na Física, principalmente na Mecânica Quântica:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{B.2})$$

onde (B.2) é a bem conhecida equação de Schrödinger independente do tempo.

O método de Numerov é utilizado para resolver problemas de contorno. O algoritmo usa iteração posterior/anterior, que, a partir de dois valores iniciais $y(x_0) = y_0$ e $y(x_1) = y_1$, calcula todos os pontos adicionais $y_i = y(x_i)$ da solução (KRIEGER, 2006). O tamanho do intervalo de discretização é h . Desse modo, expandindo em série de Taylor a função y_i em torno de h , chegamos a

$$y(x_n + h) = y_{n+1} = y(x_n) + y^{(1)}(x_n)h + \frac{h^2}{2}y^{(2)}(x_n) + \frac{h^3}{6}y^{(3)}(x_n) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_n) + \dots, \quad (\text{B.3a})$$

$$y(x_n - h) = y_{n-1} = y(x_n) - y^{(1)}(x_n)h + \frac{h^2}{2}y^{(2)}(x_n) - \frac{h^3}{6}y^{(3)}(x_n) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(x_n) - \dots, \quad (\text{B.3b})$$

onde a ordem das derivadas estão representadas pelos expoentes entre parêntesis.

Somando (B.3a) com (B.3b), obtemos

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y(x_n) + h^2y^{(2)}(x_n) + \frac{h^4}{12}y^{(4)}(x_n) + \dots, \quad (\text{B.4})$$

que nos fornece uma expressão para a segunda derivada $y^{(2)}(x)$ na forma

$$y^{(2)}(x_n) = \frac{1}{h^2} \left(y_{n+1} - 2y(x_n) + y_{n-1} - \frac{h^4}{12} y^{(4)} \right), \quad (\text{B.5})$$

cujos termos de ordem superior foram desconsiderados. Por (B.1), podemos escrever uma expressão para a quarta derivada, ou seja

$$y^{(4)}(x_n) = -\frac{d^2}{dx^2} [k(x)y(x)]. \quad (\text{B.6})$$

Utilizando (B.5), desconsiderando o termo de quarta ordem, em (B.6), podemos chegar a

$$y^{(4)}(x_n) = -\frac{k_{n+1}y_{n+1} - 2k_n y_n + k_{n-1}y_{n-1}}{h^2}. \quad (\text{B.7})$$

Substituindo (B.5) e (B.7) em (B.1), obtemos

$$\begin{aligned} -h^2 \underbrace{k(x)y(x)}_{k_n y_n} &= y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} + \frac{h^2}{12} (k_{n+1}y_{n+1} - 2k_n y_n + k_{n-1}y_{n-1}) \\ -h^2 k_n y_n &= y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} + \frac{h^2}{12} (k_{n+1}y_{n+1} - 2k_n y_n + k_{n-1}y_{n-1}). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Reagrupando os coeficientes em termos de y_i , obtemos

$$y_{n+1} = \frac{\left(2 - \frac{5h^2}{6} k_n\right) y_n - \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n-1}\right) y_{n-1}}{1 + \frac{h^2}{12} k_{n+1}}. \quad (\text{B.9})$$

A expressão (B.9) é a fórmula de iteração do algoritmo de Numerov.

Anexo

Anexos

ANEXO A

EFFECTS OF A UNIFORM MAGNETIC FIELD ON TWISTED GRAPHENE NANORIBBONS

Effects of a Uniform Magnetic Field on Twisted Graphene Nanoribbons

Camila C. Soares, Angel E. Obispo,* Andrés G. Jirón Vicente, and Luis B. Castro

In the present work, the relativistic quantum motion of massless fermions in a helicoidal graphene nanoribbon under the influence of a uniform magnetic field is investigated. Considering a uniform magnetic field (B) aligned along the axis of helicoid, this problem is explored in the context of Dirac equation in a curved space-time. As this system does not support exact solutions due to considered background, the bound-state solutions and local density of states (LDOS) are obtained numerically by means of the Numerov method. The combined effects of width of the nanoribbon (D), length of ribbon (L), twist parameter (ω), and B on the equations of motion and LDOS are analyzed and discussed. It is verified that the presence of B produces a constant minimum value of local density of state on the axis of helicoid, which is possible only for values large enough of ω , in contrast to the case for $B = 0$ already studied in the literature.

systems typically related to experimental areas, such as relativistic cosmology,^[1] orbital dynamics,^[2,3] and most recently, condensed matter physics.^[4–7] Particularly, the latter has become the subject of a large number of experimental and theoretical works^[4] that employ gravitational models to attempt to describe nanostructures with novel and complicated geometries. Some relevant examples include cosmic strings, which have been compared to disclinations in liquid crystals,^[8,9] black-hole spacetimes in ion rings,^[10] curved Lorentzian (pseudo-Riemannian) geometry to study the acoustic propagation in classical fluids,^[11] 2D Weitzenböck geometry to represent variations of the hopping parameters in graphene,^[12,13] an effective

1. Introduction

In the last 3 decades, there has been a great deal of interest in the implementation of models of general relativity in

torsion and magnetic field induced by dislocations in strain-graphene,^[14] and de Sitter space-time for Bose–Einstein condensates.^[15] Here, we will focus our attention on another special type of surface, the so-called helicoidal nanoribbon.


C. C. Soares
Departamento de Ensino
Instituto Federal do Maranhão (IFMA), Campus Zé Doca
Zé Doca, Maranhão 65365-000, Brazil

A. E. Obispo, A. G. Jirón Vicente
Facultad de Ingeniería Eléctrica y de Potencia
Universidad Tecnológica del Perú
Lima 15306, Perú
E-mail: aobispo@utp.edu.pe

A. E. Obispo
Departamento de Ciencias
Universidad Privada del Norte
Lima 15434, Perú

A. G. Jirón Vicente
Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas (FCNM)
Universidad Nacional del Callao (UNAC), Campus Central
Bellavista, Callao 07001, Perú

L. B. Castro
Departamento de Física
Universidade Federal do Maranhão, Campus Universitário do Bacanga
São Luís, Maranhão 65080-805, Brazil

 The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/andp.202200258>

© 2023 The Authors. Annalen der Physik published by Wiley-VCH GmbH. This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited and is not used for commercial purposes.

DOI: 10.1002/andp.202200258

The helicoidal surface is one of the simplest periodic curved surfaces in one direction^[16] and that has vanished mean curvature (minimal surfaces). Helicoidal microstructures occur often in biology, for example, in macro-molecules as DNA^[17–19] and in the animal and plant kingdoms.^[20] On the other hand, condensed matter examples include screw dislocations in liquid crystals^[21,22] and certain ferroelectric crystals,^[23] where the effects of curvature led to the emergence of unusual behavior of charge carriers in strong external electric and magnetic fields.

In the context of graphene, some theoretical investigations has shown that the dynamics of low-energy free electrons on helicoidal surfaces is affected by an effective potential induced by curvature effects in $(2 + 1)$ -dimensional curved space-time, in Schrödinger^[24] and Dirac^[7,25] descriptions. In addition, we can also mention some important examples related to the combined effects of the helicoidal geometry and external background fields, for example, particles confined on a helicoidal graphene ribbon interacting with da Costa potential,^[6] the emergency of pseudo-Landau levels due to a strain-induced pseudomagnetic field,^[26] or helicoidal graphene in the presence of two specific magnetic field configurations.^[27]

Inspired by these works, our work proposes to explore via numerical calculations the dynamics in $(2 + 1)$ -dimensional massless Dirac particles on a helicoidal surface in the presence of a uniform magnetic field aligned along the axis of helicoid. We analyze the behavior of the effective potentials for some values of the magnetic field (B) and the twist parameter (ω). Also, we

calculate the local density of states (LDOS) as a point of convergence between general relativity and condensed matter physics, similar to that performed by Watanabe et al. in ref. [25], where a partial LDOS was built in the context of a graphene lattice. From this study, an unexpected and counterintuitive behavior of LDOS is found. Finally, we conclude that this novel result is a consequence of the choice in the configuration of the magnetic field and a possible connection with condensed matter physics is qualitatively discussed.

2. Massless Dirac Fermions in a Helicoidal Graphene Nanoribbon

It is widely known that low-energy electronic excitations in a clean flat graphene are well described by massless 2D Dirac equation. Nevertheless, if we want to include non-trivial intrinsic curvature effects, it is necessary to extend this Dirac formulation for graphene to its curved space version. For this purpose, we consider the helicoidal graphene nanoribbon as a continuous structure without any distortion or strain, where the discreteness of the hexagonal lattice or the variations of the hopping parameters are not taken into account. Based on these considerations, we have that low-energy electronic excitations in the helicoidal graphene nanoribbon can be performed by the following bidimensional Dirac equation in a curved Riemann space^[7,25] ($\hbar = c = 1$)

$$i\gamma^\mu \nabla_\mu \Psi = 0, \quad (\mu = 0, 1, 2) \quad (1)$$

where the covariant derivative

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu \quad (2)$$

and Ψ represents a two-component spinor. The affine connection is defined by

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{8} \omega_{\mu(a)(b)} [\gamma^{(a)}, \gamma^{(b)}] \quad (3)$$

The curved-space gamma matrices are

$$\gamma^\mu = e^\mu_{(a)} \gamma^{(a)} \quad (4)$$

and satisfy the algebra $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbf{I}_{2 \times 2}$, where $g^{\mu\nu}$ is the metric tensor. The tetrads $e_\mu^{(a)}(x)$ satisfy the relations

$$\eta^{(a)(b)} = e_\mu^{(a)} e_\nu^{(b)} g^{\mu\nu} \quad (5)$$

$$g_{\mu\nu} = e_\mu^{(a)} e_\nu^{(b)} \eta_{(a)(b)} \quad (6)$$

and

$$e_\mu^{(a)} e^\mu_{(b)} = \delta_{(b)}^{(a)} \quad (7)$$

the Latin indexes being raised and lowered by the Minkowski metric tensor $\eta^{(a)(b)}$ with signature $(+, -, -)$ and the Greek ones by the metric tensor $g^{\mu\nu}$.

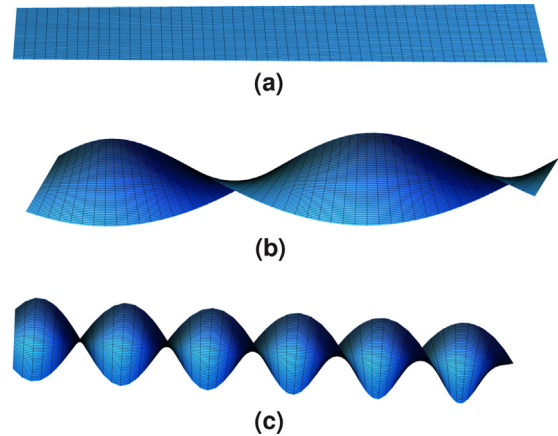


Figure 1. Helicoidal graphene nanoribbon profiles for a) $\omega = 0.01$, b) $\omega = 0.5$, and c) $\omega = 1.5$, considering $L = 10\pi$.

The spin connection $\omega_{\mu(a)(b)}$ is given by

$$\omega_\mu^{(a)(b)} = e_\alpha^{(a)} e^{\nu(b)} \Gamma_{\mu\nu}^\alpha - e^{\nu(b)} \partial_\mu e_\nu^{(a)} \quad (8)$$

with $\omega_\mu^{(a)(b)} = -\omega_\mu^{(b)(a)}$ and $\Gamma_{\mu\nu}^\alpha$ are the Christoffel symbols given by

$$\Gamma_{\mu\nu}^\alpha = \frac{g^{\alpha\beta}}{2} (\partial_\mu g_{\beta\nu} + \partial_\nu g_{\beta\mu} - \partial_\beta g_{\mu\nu}) \quad (9)$$

3. Geometric Setup of Helicoidal Surfaces

The helicoidal background geometry is described using the following parametrization

$$\begin{aligned} x &= v, \\ y &= u \cos(\omega v), \\ z &= u \sin(\omega v) \end{aligned} \quad (10)$$

where $v \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ and $u \in [-\frac{D}{2}, \frac{D}{2}]$. Here D is the width of the nanoribbon and L is the total length of the ribbon which is aligned around the x -axis. The constant $\omega = \frac{2\pi m}{L}$ is a real number that determines the chirality of the surface (twist parameter), and m is the number of 2π twists. In **Figure 1**, the helicoidal graphene nanoribbon profiles for $\omega = 0.01$, $\omega = 0.5$, and $\omega = 1.5$ are shown. One can see that the twist of the nanoribbon increases with the value of ω . Also is verified that as $\omega \rightarrow 0$, the flat graphene is reproduced. With this parameterization, the helicoidal surface can be mapped into the $(2+1)$ -dimensional space-time by the following line element,

$$ds^2 = dt^2 - du^2 - f(u)dv^2 \quad (11)$$

where $f(u) = 1 + \omega^2 u^2$, and the temporal coordinate t was projected trivially from flat $(3+1)$ -dimensional space-time where

the helicoidal ribbon lives. This allows us read the metric components on the helicoidal surface directly from Equation (11) as

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -f(u) \end{pmatrix} \quad (12)$$

The basis tetrad $e^{\mu}_{(a)}$ from the line element Equation (11) is chosen to be

$$e^{\mu}_{(a)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{f(u)}} \end{pmatrix} \quad (13)$$

For the specific basis tetrad Equation (13) the curved-space gamma matrices read

$$\gamma^t = \gamma^{(0)} \quad (14)$$

$$\gamma^u = \gamma^{(1)} \quad (15)$$

$$\gamma^v = \frac{\gamma^{(2)}}{\sqrt{f(u)}} \quad (16)$$

The non-zero components of the Christoffel symbols are given by

$$\Gamma_{vv}^u = -u\omega^2 \quad (17)$$

$$\Gamma_{uv}^v = \Gamma_{vu}^v = \frac{u\omega^2}{f(u)} \quad (18)$$

The non-zero spin connection is given by

$$\omega_{v(1)(2)} = -\omega_{v(2)(1)} = \frac{\omega^2 u}{\sqrt{f(u)}} \quad (19)$$

and the non-zero affine connection is

$$\Gamma_v = \frac{1}{4} \frac{\omega^2 u}{\sqrt{f(u)}} [\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}] \quad (20)$$

We consider the following representation,

$$\gamma^{(0)} = \sigma^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\gamma^{(1)} = i\sigma^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

and

$$\gamma^{(2)} = -i\sigma^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Thereby, in this representation the covariant derivative gets

$$\nabla_t = \partial_0 \quad (24)$$

$$\nabla_u = \partial_u \quad (25)$$

$$\nabla_v = \partial_v - \frac{\omega^2 u}{\sqrt{f(u)}} \frac{i\sigma^{(3)}}{2} \quad (26)$$

Having set up the Dirac equation in a curved space-time, we are now in a position to use the machinery developed above in order to solve the Dirac equation in this background with some specific forms for external interactions.

4. Massless Fermions in a Helicoidal Graphene Nanoribbon in the Presence of an Electromagnetic Field

In this section, we concentrate our efforts in the study of the electromagnetic interaction embedded in the background of a helicoidal nanoribbon. For this external interaction we use the minimal coupling ($e = 1$)

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + iA_\mu \quad (27)$$

Considering only the v -component $A_\mu = (0, 0, A_v(u))$, the Dirac equation (Equation (1)) becomes

$$(i\gamma^\mu \nabla_\mu - \gamma^v A_v) \Psi = 0 \quad (28)$$

As the interaction is time-independent one can write

$$\Psi(u, v) = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \Psi^+(u, v) \\ \Psi^-(u, v) \end{pmatrix} \quad (29)$$

where E is the energy of the fermion, Ψ^+ and Ψ^- are the upper and lower components, respectively. Inserting Equations (14), (15), (16), (24), (25), (26), and (29) in Equation (28), we obtain two coupled first-order equations for the upper (Ψ^+) and lower (Ψ^-) components

$$\left(i\partial_u + \frac{i\omega^2 u}{2f(u)} + \frac{1}{\sqrt{f(u)}} \partial_v - iA_v \right) \Psi^- = -E\Psi^+ \quad (30)$$

$$\left(i\partial_u + \frac{i\omega^2 u}{2f(u)} - \frac{1}{\sqrt{f(u)}} \partial_v + iA_v \right) \Psi^+ = -E\Psi^- \quad (31)$$

Since v is a cyclic coordinate, we can consider ωv and $L_v = -\frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial v}$ as the azimuthal angle and the angular momentum operator around the axis of the helicoid (cylindrical symmetry), respectively. The operator L_v satisfies $L_v \Psi(u, v) = l\Psi(u, v)$, with $l \in \mathbb{Z}$ and it commutes with the Hamiltonian

$$H = \gamma^{(0)} \gamma^i (\hat{p}_i + A_i) \quad (32)$$

therefore, both have simultaneous eigenfunctions. It is important to mention that the value of l determines the direction the fermions takes along the axis, that is, when $l > 0$ the fermions go up and when $l < 0$, they go down. Using the following ansatz

$$\Psi^\pm(u, v) = \frac{\phi^\pm(u)}{\sqrt{f(u)}} e^{i\omega v} \quad (33)$$

the Equations (30) and (31) can be reduced to

$$i \left(\partial_u + \frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} - A_v \right) \phi^- = -E\phi^+ \quad (34)$$

$$i \left(\partial_u - \frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} + A_v \right) \phi^+ = -E\phi^- \quad (35)$$

These two coupled first-order equations can be decoupled for $E \neq 0$. By using the expression for ϕ^+ obtained from Equation (34) and inserting it in Equation (35) one obtains a second-order differential equation for ϕ^- . In a similar way, using the expression for ϕ^- obtained from Equation (35) and inserting it in Equation (34) one obtains a second-order differential equation for ϕ^+ . It is possible to write both expressions as two supersymmetric Schrödinger-like equations

$$-\frac{d^2 \phi^\pm}{du^2} + V_l^\pm(u) \phi^\pm = E^2 \phi^\pm \quad (36)$$

where the corresponding effective potentials are

$$V_l^\pm(u) = W_l^2 \pm \frac{dW_l}{du} \quad (37)$$

with the superpotential given by

$$W_l(u) = \frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} - A_v \quad (38)$$

These last results show that the solution for this class of problem consists in searching for bound-state solutions for two Schrödinger-like equations. It should not be forgotten, though, that the equations for ϕ^+ or ϕ^- are not indeed independent because E appears in both equations. Therefore, one has to search for bound-state solutions for both signals in Equation (36) with a common energy.

4.1. Free Massless Fermions

At this stage, we are interested in a vector potential $A_\mu = 0$ ($B = 0$). In this case, the two supersymmetric Schrödinger-like Equations (36) and the corresponding effective potentials Equation (37) keep their mathematical structure intact with the superpotential given by

$$W_l(u) = \frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} \quad (39)$$

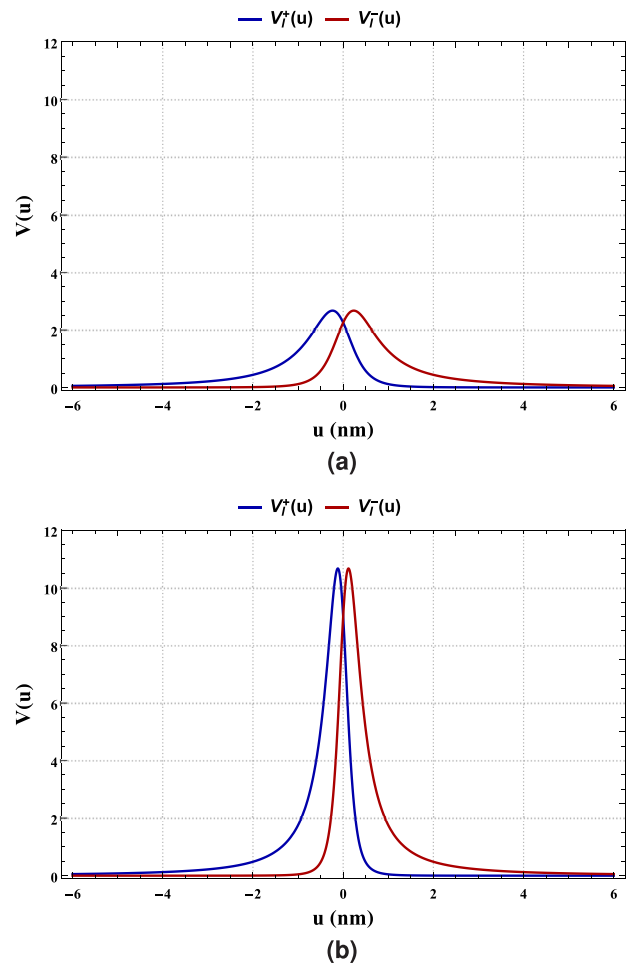


Figure 2. The panels show the effective potentials $V_l^\pm(u)$ for a) $\omega = 1.5$ and b) $\omega = 3.0$, considering $l = 1$ and $B = 0$ T.

Substituting Equation (39) into Equation (37), we obtain

$$V_l^\pm(u) = \left(\frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} \right)^2 \mp \left(\frac{u\omega^3 l}{\sqrt{f(u)}^3} \right) \quad (40)$$

It is important to highlight that this effective potential is caused by purely geometrical effects induced by the helicoidal parametrization. Note that from Equation (40) the effective potentials satisfy the relation $V_l^+(u) = V_l^-(-u)$. This result means that the change of chirality $\omega \rightarrow -\omega$ interchanges the effective potentials, thus $V_l^+(u)$ turns into $V_l^-(u)$, and viceversa. In **Figure 2**, we illustrate the behavior of the effective potential for $l = 1$ and two different values of ω , which emerges as the only control parameter of the system. In both cases, the profiles are composed by a barrier potential tending to zero as $u \rightarrow \pm\infty$ and there are only scattering states. Fixing $l = 1$ in Equation (40), one can show that the peak of the barrier increases as ω increases. In this particular case, the maximum value of V_l^\pm is $1.19\omega^2$.

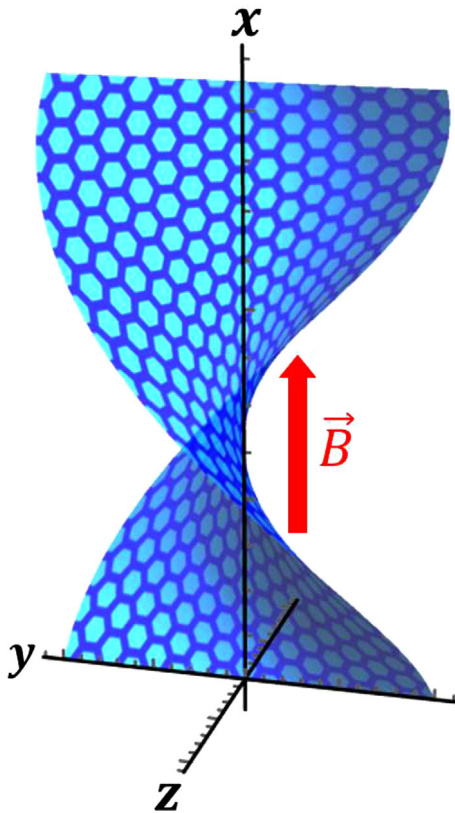


Figure 3. Geometric structure of a helicoidal surface in presence of a uniform magnetic B in the direction of its axis.

4.2. Uniform Magnetic Field

At this stage, we are interested in a vector potential A_μ which provides a uniform magnetic field aligned along the axis of helicoid, $\vec{B} = B\hat{i}$ (see **Figure 3**), with $B > 0$. This is obtained considering the following configuration for the vector potential (see Appendix A)

$$A_v(u) = \frac{B}{2\omega} \sqrt{f(u)} \quad (41)$$

Substituting Equation (41) into Equation (37), we have the following expression for the effective potentials

$$V_i^\pm(u) = \left(\frac{l\omega}{\sqrt{f(u)}} - \frac{B}{2\omega} \sqrt{f(u)} \right)^2 \mp \left(\frac{u\omega^3 l}{\sqrt{f(u)}^3} + \frac{u\omega B}{2\sqrt{f(u)}} \right) \quad (42)$$

From Equation (42), we can see that the effective potentials satisfy the relation $V_i^+(u) = V_i^-(-u)$. This last result means that the change of chirality $\omega \rightarrow -\omega$ interchanges the effective potentials, thus $V_i^+(u)$ turns into $V_i^-(u)$, and viceversa. The behavior of the effective potentials V_i^\pm is plotted in **Figure 4** for $l = 2$, $B = 0.8$ T, and $\omega = 1.5$, where the value of the parameters related to the

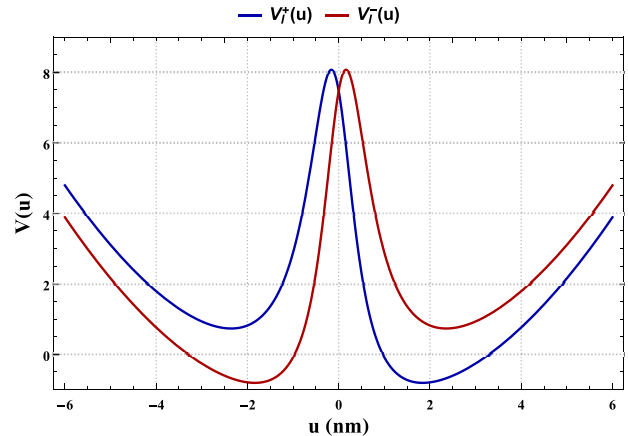


Figure 4. Effective potentials for the helicoidal nanoribbon for $l = 2$, $\omega = 1.5$, and $B = 0.8$ T.

ometry of the nanoribbon were conveniently fixed at $D = 12.0$ nm and $L = 10\pi$. **Figure 4** shows that the profiles of effective potentials V_i^\pm are formed for two potential wells of different depth and a potential barrier between the wells. The presence of well structure is necessary for the existence of bound-state solutions and this is a consequence of the presence of the uniform magnetic field. Note that the two supersymmetric Schrödinger-like Equation (36) with the effective potentials (Equation (42)) do not support exact solutions due to the chosen background geometry, so our results for the bound-state solutions and local density of state must be obtained numerically. This issue will be addressed in the following subsection.

4.3. An Application: Local Density of States

In this subsection, our goal is to analyze the way in which the states are distributed on the helicoidal surface by the effect of the uniform magnetic field. To achieve our goal, we need to calculate the LDOS of the system, which is defined by

$$\rho(u) = \frac{1}{2} \sum_{n,l} \left[\left| \Psi_{n,l}^+(u) \right|^2 + \left| \Psi_{n,l}^-(u) \right|^2 \right] \quad (43)$$

where n is the principal quantum number.

4.3.1. Free Massless Fermions

Figure 5 illustrates the behavior of the partial LDOS (PLDOS) $\rho_l(u)$ for $l = 1$, $B = 0$ T, $E = \sqrt{2.5}$, with $\omega = 1.5$ (**Figure 5a**) and $\omega = 10.0$ (**Figure 5b**). As discussed in Section 4.1, the profiles of the effective potentials are composed by a barrier potential tending to zero as $u \rightarrow \pm\infty$. This profile implies that there are only scattering states. The maximum value of $V_1^\pm = 1.19\omega^2$, that is, the peak of the barrier increases as ω increases. It is important to highlight that ω is also related to twist around to axis of helicoid (twist parameter), namely, $\omega = 2\pi m/L$, where m is the number of 2π twists. In our case, $\omega = 1.5$ and $\omega = 10.0$ are equivalent to 7.5 and 50 twisted, respectively. This means that when the nanoribbon is twisted more times (large values of ω), the states tend to

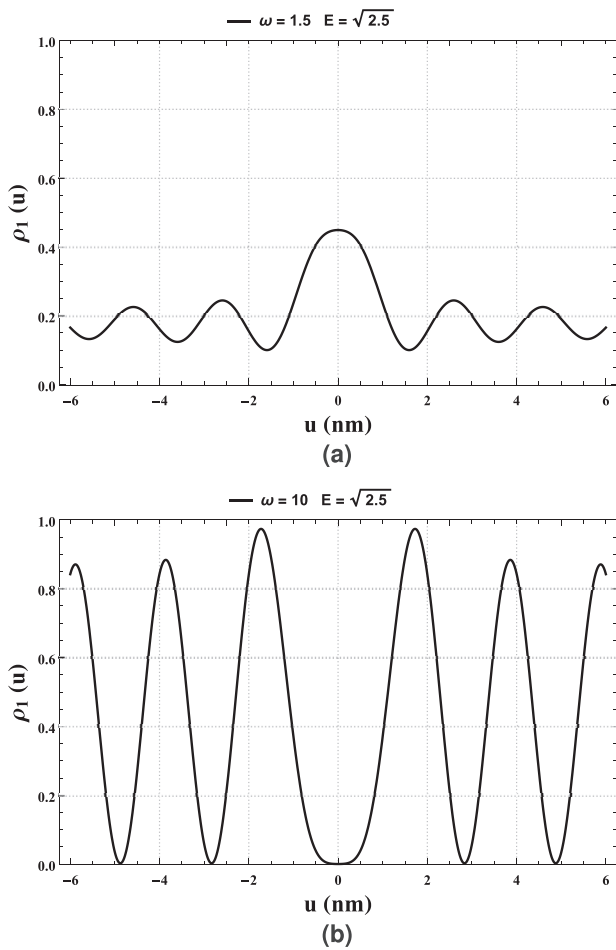


Figure 5. The panels show the partial local density of states $\rho_l(u)$ for a) $\omega = 1.5$ and b) $\omega = 10.0$, considering $l = 1$, $B = 0$ T, and $E = \sqrt{2.5}$.

shift for regions away from the axis of the helicoid. This behavior occurs due to increase in the intensity of the barrier (a more repulsive potential), which maintains its peak close to the axis of the helicoid. This analysis is in accordance with the results shown in the panels of Figure 5, where we see that for $\omega = 1.5$ (Figure 5a), the PLDOS is concentrated mainly in regions close to the axis of the helicoid. However, when ω increases to 10.0 (Figure 5b), we see that the PLDOS tends to zero in the axis of the helicoid, while the concentration of states increase in regions away from it. In ref. [25], the authors have investigated massless Dirac particles on a helicoid via the massless Dirac equation on curved space-time. They have showed that bound-states solutions are absent, and thus they have studied the scattering probabilities and the phase shifts. By means of numerical calculations, they have examined the LDOS around the axis of the helicoid. In ref. [25], the authors do not consider a uniform magnetic field aligned along the axis of helicoid, nor the effects of the twist parameter on the effective potential profile, nor the effects of the twist parameter on the LDOS. Our results represent an extension to those shown in ref. [25], where another parametrization is used.

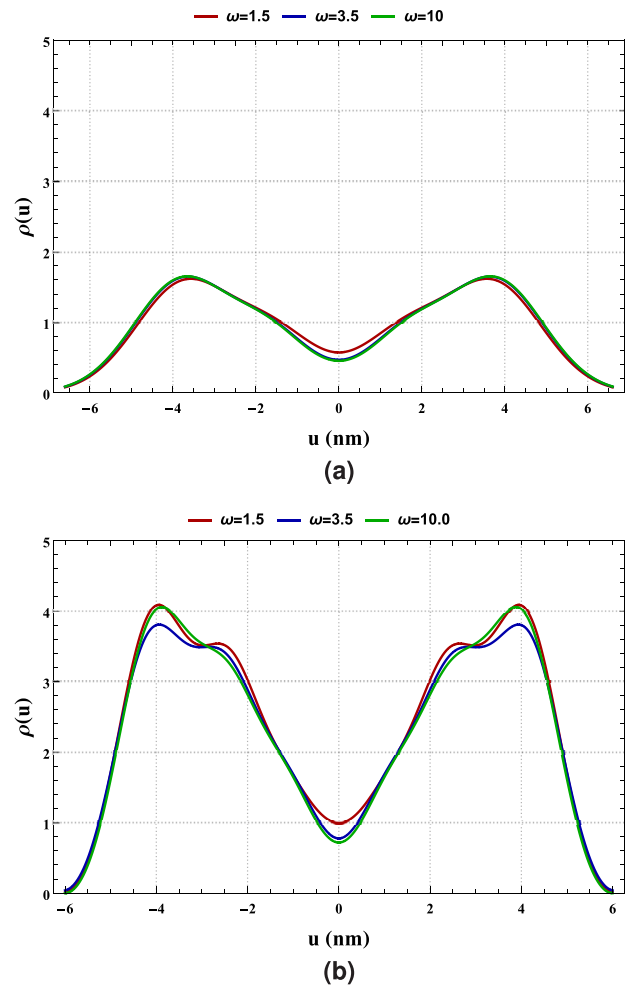


Figure 6. The panels show the local density of states $\rho(u)$ for a) $B = 0.5$ T and b) $B = 0.8$ T, considering $D = 12.0$ nm, $\omega = 0.5$ (black line), $\omega = 3.5$ (blue line), and $\omega = 10.0$ (red line).

4.3.2. Uniform Magnetic Field

The results for $B \neq 0$ T are shown in the **Figure 6**, where we illustrate the profiles of LDOS $\rho(u)$ for two values of magnetic field, $B = 0.5$ T (Figure 6a) and $B = 0.8$ T (Figure 6b). All bound states involved in the construction of $\rho(u)$ given by Equation (43) were computed numerically using the Numerov method. From Equation (42) we see that the height of the barrier between the wells increases as ω increases, while its width decreases as B increases. From Figure 6, we observe the same behavior as in the case $B = 0$ T, that is, as ω increases, the tendency of the states is to concentrate on regions away from the axis of the helicoid. However, surprisingly, we see that for large enough values of ω , as for instance $\omega = 10$, the LDOS on the axis is fixed at a single constant value. This point of minimum density of states is approximately $\rho_{\min} \approx 0.5$ for $B = 0.5$ T and $\rho_{\min} \approx 0.71$ for $B = 0.8$ T. In this sense, we can infer that this peculiar behavior of the system is an effect of the confinement produced by the configuration of the uniform magnetic field, which maintains some states

of particles captured to axis of the helicoid, no matter how many times it twists.

This is a surprising and highly counterintuitive result, which occurs from $\omega \approx 3.5$ onward, according to Figure 6. From a qualitative perspective, we believe that this particular value of ω could be related to the so-called “critical angle,” which determines the breaking point or fracture of the flat elastic nanoribbon subject to twist.^[28,29] Assuming that this fracture of the helicoidal nanoribbon occurs at points on its axis (the lattice constant is approximated locally to be zero),^[29] it is reasonable to assume that the density of states at $u = 0$ is minimized. According to this, the critical angle for the free case ($B = 0$ T) would occur for $\omega_c \approx 10$, when the states leave the axis of the helicoid ($\rho_l \rightarrow 0$) due to a possible fracture on the axis. However, when a uniform magnetic field is introduced into the system, this critical angle decreases to $\omega_c \approx 3.5$, that is, the magnetic field accelerates the process of breaking the graphene, but keeping some states trapped on the axis ($\rho \rightarrow cte$). On the other hand, ref. [29] showed (via DFT calculations) that an isolated graphene lattice reconstructs itself after twisting beyond a critical angle. This behavior is typically associated with some kind of phase transition observed in a twist energy diagram, where the discontinuity in the transition zone occurs exactly at the critical angle. Although the methods used in this work do not allow us to analyze such phase transitions, it is possible to appreciate some indications of such discontinuities for large values of ω (strongly twisted nanoribbon), specifically, in our effective potentials, which becomes

$$V_i^+(u) = \frac{(Bu - 2l)^2}{4u^2}, V_i^-(u) = \frac{Bu^2 + 2l}{2u^2} \quad (44)$$

Note that the above expressions are singular in $u = 0$, and, furthermore, their solutions will also be singular at the same point. In this sense, we can say that for values of $\omega < \omega_c$, the system remains in one stable ordered phase, where the predominant concentration of states occurs in the region near to the axis of the nanoribbon. However, as we approach the critical value ω_c , the LDOS adopts a constant value at the axis, which is an effect produced by those states trapped by the magnetic field. Finally, when $\omega = \omega_c$, the LDOS becomes discontinuous due to the singular states, which means that a phase transition is about to occur. In ref. [27], the authors have considered the quantum mechanics of a charged particle on a helicoid in an external magnetic field via the Schrödinger equation on a 2D curved surface. Choosing two simple magnetic field configurations, they have examined the behavior of the effective potentials for different values of angular momentum and the applied magnetic field strength. They also have obtained approximate expressions for the energy levels, which are valid when the particle is near a minimum and these are similar to the energy levels of a particle in a harmonic oscillator potential. In ref. [27], the authors do not consider the massless Dirac equation on curved space-time, nor the effects of twist parameter on the effective potential profile, nor the construction of the LDOS, nor a uniform magnetic field aligned along the axis of their infinite helicoid. With respect to this last point, it is important to mention that an infinite helicoidal graphene (D and $L \rightarrow \infty$) represents non-realizable scenario in the context of our parametrization. This is because the twist parameter $\omega = 2\pi m/L$ tends to zero as $L \rightarrow \infty$, which transforms the helicoidal geome-

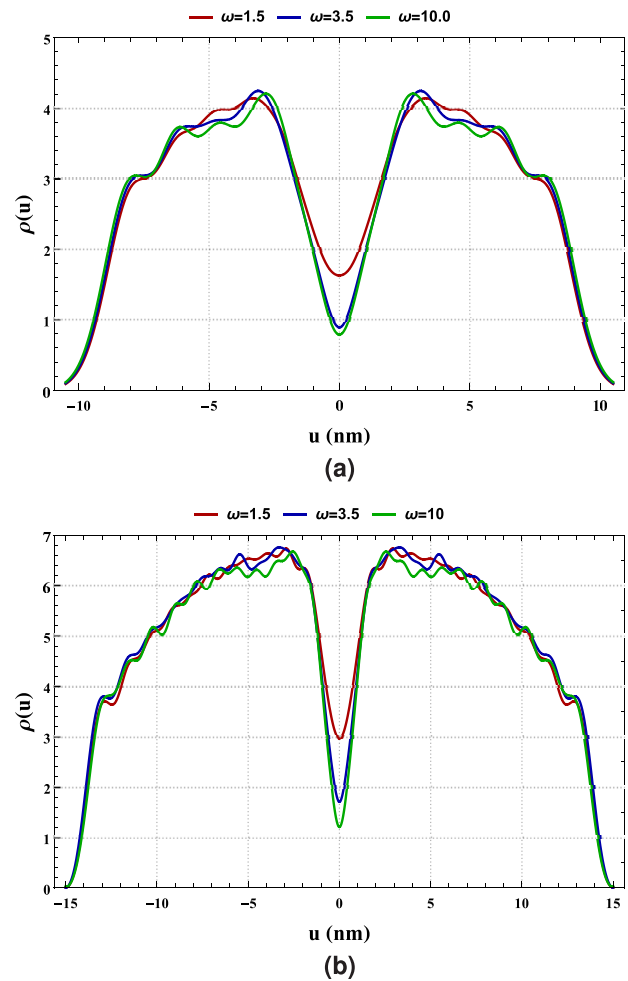


Figure 7. The panels show the local density of states $\rho(u)$ for a) $D = 20.0$ nm and b) $D = 30.0$ nm, considering $B = 0.5$ T, $\omega = 0.5$ (black line), $\omega = 3.5$ (blue line), and $\omega = 10.0$ (red line).

try of graphene to its flat version (see Figure 1). By the other hand, a semi-infinite helicoidal graphene (fixed L and $D \rightarrow \infty$) provides a more realistic scenario, nevertheless, we have $\rho_{\min} \rightarrow \infty$, due to the infinite states confined within the infinite potential well. This means that it is not possible to determine a break point of the material (there will be no phase transition), and any control parameters related to the twist of helicoidal graphene will be irrelevant. These statements are verified from the **Figure 7**, which shows the behavior of the LDOS for different values of D , where it can be seen that ρ_{\min} increases with increasing D . In this way, when $D \rightarrow \infty$, we have $\rho_{\min} \rightarrow \infty$.

5. Conclusions

We have studied the problem of massless Dirac fermions moving in (2+1)-dimensional on a helicoidal surface in the presence of a uniform magnetic field aligned along the axis of the helicoidal nanoribbon. We have shown that the standard decomposition of this Dirac equation into its upper and lower components produces a set of two supersymmetric Schrödinger-like equations. The effective potential for each component ($B \neq 0$ T) is formed

by two potential wells separated by a finite barrier, which is completely confining due to the presence of magnetic field. Nevertheless, the number of bound states is finite because the dimensions of the helicoidal nanoribbon are also finite. On the other hand, for the free case ($B = 0$ T), where only scattering states are present, the effective potential is a barrier potential, which, for small values of ω (slightly twisted nanoribbon), produces a LDOS whose region of predominant concentration occurs at points near to the axis of the nanoribbon. However, when ω increases, the repulsive intensity of the barrier also increases, making the concentration of states to shift in regions away from the axis, where the partial density of states tends to zero. It was observed that the behavior of the LDOS for $B \neq 0$ T is the same as in the free case $B = 0$ T for similar values of ω . Nevertheless, for large enough values of ω (strongly twisted nanoribbon), the LDOS on the axis reaches a constant value of minimum density, that is, no matter how many times the helicoid is twisted, there will always be a concentration of states on its axis. This novel result is produced by the configuration of the uniform magnetic field.

As mentioned, a feasible experimental realization of our results can occur in the context of condensed matter physics, particularly, in the study of the phase transitions where the twist angle (associated to our ω), is used as a control parameter, which determines the breaking point of a nanoribbon subject to twist. Although this connection with the critical angle and the phase transitions was carried out from a qualitative approach, we believe that the results found in this work will be useful to extend those shown in refs. [28, 29]. In fact, this analysis is currently in development and will be shown in our next work.

Appendix A: Derivation of the Electromagnetic Potential

Using the following parametrization

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu \\ u \cos(\omega\nu) \\ u \sin(\omega\nu) \end{pmatrix} \quad (\text{A1})$$

the position vector \vec{r} is given by

$$\vec{r} = \nu \hat{i} + u \cos(\omega\nu) \hat{j} + u \sin(\omega\nu) \hat{k} \quad (\text{A2})$$

Performing the standard procedure, one can write the new bases as

$$\hat{e}_i = \frac{\partial_i \vec{r}(u, \nu)}{|\partial_i \vec{r}(u, \nu)|}, \quad \text{for } i = u, \nu \quad (\text{A3})$$

From this last expression, we get

$$\hat{e}_u = \cos(\omega\nu) \hat{j} + \sin(\omega\nu) \hat{k} \quad (\text{A4a})$$

$$\hat{e}_\nu = \frac{\hat{i} - \omega u \sin(\omega\nu) \hat{j} + \omega u \cos(\omega\nu) \hat{k}}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} \quad (\text{A4b})$$

where

$$\partial_u \vec{r}(u, \nu) = \cos(\omega\nu) \hat{j} + \sin(\omega\nu) \hat{k} \quad (\text{A5a})$$

$$\partial_\nu \vec{r}(u, \nu) = \hat{i} - \omega u \sin(\omega\nu) \hat{j} + \omega u \cos(\omega\nu) \hat{k} \quad (\text{A5b})$$

was used. At this point, one can do the inverse procedure to write the Cartesian partial derivatives ($\partial_x, \partial_y, \partial_z$) as a function of the partial derivatives ∂_u and ∂_ν . In this way, we have

$$\partial_x = \frac{\partial}{\partial \nu} \quad (\text{A6a})$$

$$\partial_y = \cos(\omega\nu) \frac{\partial}{\partial u} - \frac{\sin(\omega\nu)}{\omega u} \frac{\partial}{\partial \nu} \quad (\text{A6b})$$

$$\partial_z = \sin(\omega\nu) \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\cos(\omega\nu)}{\omega u} \frac{\partial}{\partial \nu} \quad (\text{A6c})$$

Then, using the bases \hat{e}_u and \hat{e}_ν , one can find the spatial component of the electromagnetic four-potential $A^\alpha = (A_0, \vec{A})$, that is

$$\vec{A} = A_u \hat{e}_u + A_\nu \hat{e}_\nu = A_x \hat{i} + A_y \hat{j} + A_z \hat{k} \quad (\text{A7})$$

where

$$A_x = \frac{A_\nu}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} \quad (\text{A8a})$$

$$A_y = A_u \cos(\omega\nu) - A_\nu \frac{\omega u \sin(\omega\nu)}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} \quad (\text{A8b})$$

$$A_z = A_u \sin(\omega\nu) + A_\nu \frac{\omega u \cos(\omega\nu)}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} \quad (\text{A8c})$$

A.1. Uniform Magnetic Field

One can calculate the magnetic field aligned along the axis of the helicoid ($\vec{B} = B \hat{i}$) from

$$B = \partial_y A_z - \partial_z A_y \quad (\text{A9})$$

Substituting the Equations (A6b), (A6c), (A8b), and (A8c), we get

$$B = \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\omega u A_\nu}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} \right) + \frac{\omega A_\nu}{\sqrt{1 + u^2 \omega^2}} - \frac{1}{\omega u} \frac{\partial}{\partial \nu} A_u \quad (\text{A10})$$

In order to obtain a uniform magnetic field ($B = \text{cte}$), one can properly choose $A_u = 0$ and

$$A_\nu = \frac{B}{2\omega} \sqrt{1 + u^2 \omega^2} \quad (\text{A11})$$

Acknowledgements

The authors are indebted to the anonymous referees for an excellent and constructive review. This work was supported in part by means of the funds provided by CNPq, Brazil, Grant No. 311925/2020-0 (PQ) and Grant No. 422755/2018-4 (UNIVERSAL); FAPEMA, Brazil, Grant No. UNIVERSAL-01220/18; and CAPES, Brazil.

Conflict of Interest

The authors declare no conflict of interest.

Data Availability Statement

The data that support the findings of this study are available from the corresponding author upon reasonable request.

Keywords

Dirac equation, graphene, helicoidal nanoribbons, magnetic fields

Received: June 2, 2022

Revised: November 23, 2022

Published online: March 27, 2023

-
- [1] G. F. Ellis, R. Maartens, M. A. MacCallum, *Relativistic Cosmology*, Cambridge University Press, Cambridge **2012**.
- [2] J. Steinhoff, T. Hinderer, A. Buonanno, A. Taracchini, *Phys. Rev. D* **2016**, *94*, 104028.
- [3] L. Iorio, *Sol. Phys.* **2012**, *281*, 826.
- [4] A. Cortijo, F. Guinea, M. A. Vozmediano, *J. Phys. A: Math. Theor.* **2012**, *45*, 383001.
- [5] A. Cortijo, M. A. Vozmediano, *EPL* **2007**, *77*, 47002.
- [6] V. Atanasov, R. Dandoloff, A. Saxena, *Phys. Rev. B* **2009**, *79*, 033404.
- [7] V. Atanasov, A. Saxena, *Phys. Rev. B* **2015**, *92*, 035440.
- [8] A. Cortijo, M. A. Vozmediano, *Nucl. Phys. B* **2007**, *763*, 308.
- [9] A. Cortijo, M. A. Vozmediano, *Eur. Phys. J.: Spec. Top.* **2007**, *148*, 89.
- [10] B. Horstmann, B. Reznik, S. Fagnocchi, J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *104*, 250403.
- [11] M. Visser, *arXiv:gr-qc/9311028*, **1993**.
- [12] G. Volovik, M. Zubkov, *Ann. Phys.* **2014**, *340*, 368.
- [13] M. Zubkov, G. Volovik, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2015**, *607*, 012020.
- [14] G. Volovik, M. Zubkov, *Ann. Phys.* **2015**, *356*, 268.
- [15] P. O. Fedichev, U. R. Fischer, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 240407.
- [16] D. Hoffman, F. Wei, *Exp. Math.* **2002**, *11*, 218.
- [17] M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard, *Phys. Lett. A* **1999**, *253*, 369.
- [18] A. Dang Koko, C. Tabi, H. Ekobena Fouda, A. Mohamadou, T. Kofané, *Chaos* **2012**, *22*, 110.
- [19] T. Dauxois, *Phys. Lett. A* **1991**, *159*, 395.
- [20] B. D. Wilts, H. M. Whitney, B. J. Glover, U. Steiner, S. Vignolini, *Mater. Today: Proc.* **2014**, *1*, 185.
- [21] R. D. Kamien, T. C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.* **1999**, *82*, 2892.
- [22] R. D. Kamien, J. V. Selinger, *J. Phys.: Condens. Matter* **2001**, *13*, R1.
- [23] D. M. Walba, E. Körblova, R. Shao, J. E. MacLennan, D. R. Link, M. A. Glaser, N. A. Clark, *Science* **2000**, *288*, 2184.
- [24] B. Jensen, *Phys. Rev. A* **2009**, *80*, 022101.
- [25] M. Watanabe, H. Komatsu, N. Tsuji, H. Aoki, *Phys. Rev. B* **2015**, *92*, 205425.
- [26] D. B. Zhang, G. Seifert, K. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **2014**, *112*, 096805.
- [27] M. A. Sulangi, Q. M. Sugon Jr., *arXiv:1211.5699*, **2012**.
- [28] J. Chopin, A. Kudrolli, *Phys. Rev. Lett.* **2013**, *111*, 174302.
- [29] E. Diniz, *App. Phys. Lett.* **2014**, *104*, 083119.