



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ESTUDO DO EFEITO DA ROTAÇÃO E CAMPOS
ELETROMAGNÉTICOS NA MECÂNICA QUÂNTICA DO
ELÉTRON E SUAS IMPLICAÇÕES NAS PROPRIEDADES
ÓPTICAS

Daniel França Lima

SÃO LUÍS, JUNHO DE 2024

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Edilberto Oliveira Silva

Doutor em Física - UFMA

SÃO LUÍS, JUNHO DE 2024

DANIEL FRANÇA LIMA

**Estudo do efeito da rotação e campos
eletromagnéticos na mecânica quântica do
elétron e suas implicações nas propriedades
ópticas**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito para obtenção do grau de Doutor em Física.

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

França Lima, Daniel.

Estudo do Efeito da Rotação e Campos Eletromagnéticos
Na Mecânica Quântica do Elétron e Suas Implicações Nas
Propriedades Ópticas / Daniel França Lima. - 2024.
145 p.

Orientador(a): Edilberto Oliveira Silva.

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

1. Mecânica Quântica. 2. Referenciais Não Inerciais.
3. Aharonov-bohm. 4. Anéis Quânticos. 5. Óptica Não
Linear. I. Oliveira Silva, Edilberto. II. Título.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edilberto Oliveira Silva (Orientador)

UFMA

Prof. Dr. Luis Rafael Benito Castro

UFMA

Prof. Dr. Diego Paiva Pires

UFMA

Prof. Dr. Roberto Vinhaes Maluf Cavalcante

UFC

Prof. Dr. José Joatan Rodrigues Júnior

UFS

Prof. Dr. Bertúlio de Lima Bernardo

UFPB

Agradecimentos

A Deus, por tudo.

Ao meu orientador, professor Edilberto, pela paciência e orientação desde os tempos de iniciação científica e pelas reuniões sempre produtivas, mas também com muitos momentos de conversas e descontração.

Aos meu pais Antônio e Maria, meu irmão Rafael e à minha família que sempre me ajudaram e incentivaram.

Aos amigos que fiz no curso e levarei para vida: João Luís, Marcos Vinícius, Joelson, Marcos Lima, João Alfíeres, Joel Anderson, Joel Félix, Kayman, Neyver Henry, Arthur, Jerdson, Jucelino e ao Janielton. Aos amigos dos tempos de escola Pedro Alexandre, Paulo Riler, Edilson, Mateus e Rafael Bruno. As brincadeiras e as gargalhadas tornaram tudo mais leve.

À Rayanne, que é a melhor amiga que alguém poderia ter. Obrigado por compartilhar a tua vida comigo e me ouvir. Teu apoio foi imprescindível para que eu chegasse até aqui.

Gostaria de agradecer aos professores do Departamento de Física, Rodolfo Casana, Marco Schreck e Diego Paiva, pelo papel essencial em minha formação e pela constante disponibilidade em compartilhar seus conhecimentos. Em particular, sou grato ao professor Rodolfo Casana por ter me ajudado quando roubaram um livro da biblioteca que estava comigo, permitindo-me concluir a graduação e ingressar no mestrado. Agradeço também ao professor Manoel Messias pelas discussões sobre equação de Dirac, lá na iniciação científica.

À Fapema pelo apoio financeiro e pelo PPGF pelo suporte.

Resumo

Nesta tese, estudamos a mecânica quântica em referenciais não inerciais em dois cenários diferentes. Primeiro, estudamos os efeitos de rotação no problema de Aharonov-Bohm (AB) não relativístico para partículas de spin-1/2 para estados ligados. Usamos uma técnica baseada no método de extensão auto-adjunta e determinamos uma expressão para as energias dos estados ligados. A inclusão do elemento de spin na Hamiltoniana garante a existência de soluções de estados ligados. Apresentamos uma análise numérica das energias e verificamos que tanto os graus de liberdade de rotação como os de spin afetam as energias da partícula. O principal efeito que observamos nesta análise é um valor de corte, manifestado no parâmetro de fluxo de AB, que limita os valores das energias positivas e negativas. Em seguida, consideramos os efeitos da rotação no movimento quântico não relativístico de uma partícula carregada confinada a um anel 2D na presença do efeito AB e de um campo magnético uniforme. Começamos por formular a equação de Schrödinger com um acoplamento mínimo, incluindo o campo de calibre para o referencial em rotação e o vetor potencial do campo eletromagnético. Resolvendo a equação do movimento, determinamos os autovalores e as autofunções da partícula. Analisamos a distribuição de probabilidades em função da variação dos valores dos parâmetros de rotação e observamos uma mudança notável na distribuição. Esta mudança indica uma maior probabilidade de localizar os elétrons nas bordas do anel. Em seguida, passamos a investigar os efeitos da rotação nas propriedades ópticas lineares e não lineares do sistema. Em particular, estudamos as alterações lineares, não lineares e totais do índice de refração, bem como os coeficientes de absorção óptica. Através de análise numérica, demonstramos efeitos significativos da rotação nos níveis de energia e nas propriedades ópticas. Os nossos resultados indicam que, para os parâmetros físicos considerados, o efeito da rotação nas propriedades ópticas torna-se proeminente em valores da ordem de alguns terahertz.

Palavras chave: Mecânica quântica, referenciais não inerciais, efeito Aharonov-Bohm, anéis quânticos, óptica não linear

Abstract

In this thesis, we study quantum mechanics in non-inertial reference frames in two different scenarios. First, we study the effects of rotation in the spin-1/2 non-relativistic Aharonov-Bohm problem for bound states. We use a technique based on the self-adjoint extension method and determine an expression for the energies of the bound states. Including the spin element in the Hamiltonian guarantees bound state solutions. We perform a numerical analysis of the energies and verify that both the rotation and the spin degrees of freedom affect the energies of the particle. The main effect we observe in this analysis is a cut-off value manifested in the AB flux parameter, which limits the values of the positive and negative energies. We then consider the effects of rotation on the nonrelativistic quantum motion of a charged particle confined to a 2D ring in the presence of the AB effect and a uniform magnetic field. We first formulate the Schrödinger equation with minimal coupling, including the rotating frame gauge field and the electromagnetic field's potential vector. By solving the equation of motion, we determine the eigenvalues and eigenfunctions of the particle. We analyze the probability distribution as a function of varying rotation parameter values and observe a noticeable shift in the distribution. This shift indicates a higher probability of locating the electron at the ring's edges. We then investigate the effects of rotation on the system's linear and nonlinear optical properties. In particular, we study the linear, nonlinear, and total refractive index changes and the optical absorption coefficients. We demonstrate significant rotation effects on energy levels and optical properties through numerical analysis. Our results indicate that, for the physical parameters considered, the effect of rotation on the optical properties becomes prominent at values of the order of a few terahertz.

Keywords: Quantum mechanics, non-inertial references, Aharonov-Bohm effect, quantum rings, non-linear optics

Lista de Figuras

1.1	a) Micrografia do anel tirada com AFM após a gravação da estrutura. b) Esboço esquemático do anel [1].	6
2.1	Esquema ilustrativo do efeito AB elétrico. Um feixe de elétrons é dividido, guiado através de duas caixas metálicas, que funcionam como gaiolas de Faraday, e finalmente os feixes são reunidos formando um padrão de interferência numa tela. O padrão de interferência na tela depende dos potenciais, mesmo que os elétrons se propaguem em regiões em que o campo elétrico é nulo.	16
2.2	Esquema ilustrativo do efeito AB magnético. Um feixe de elétrons é dividido em dois, cada um passando ao lado de um solenoide com um campo magnético em seu interior. O padrão de interferência das partículas depende do fluxo magnético do solenoide, mesmo que os elétrons se propaguem por regiões onde o campo magnético é nulo.	18
2.3	Figura esquemática representando as linhas de campo e potencial magnéticos criados no solenoide.	19
4.1	Energia como função do fluxo. Nas Figs. (a)-(c), consideramos três faixas de frequência diferentes para $m = 0$ e $R = 5$ nm. Na Fig. (d), consideramos alguns valores de R para $m = 0$ e $\Omega = 0$	44
4.2	Energia como função de Ω para dois intervalos diferentes de ϕ com $m = 0$ e $R = 5$ nm. Para valores de ϕ menores que 0.5, as energias são positivas (painel (a)), enquanto para valores maiores elas são negativas (painel (b))).	45
4.3	Energia como uma função Ω e ϕ para $m = 0$ e $R = 5$ nm. Para valores de ϕ maiores que 0.5, as energias são negativas, enquanto que para valores menores elas são positivas. Esse efeito se deve à presença de rotação.	45

5.1	Emissão e absorção induzidas em um sistema de dois níveis pela interação com a luz.	55
6.1	Perfil do potencial radial que descreve um anel de raio médio $\rho_0 = 20$ nm e $\hbar\omega_0 = 40$ meV.	67
6.2	Densidade de probabilidade para rotações positivas. Em (a), temos o esboço para $(n = 0, m = 0)$ e, em (b), para $(n = 2, m = 1)$	69
6.3	Densidade de probabilidade para rotações negativas. Em (a), temos o esboço para $(n = 0, m = 0)$ e, em (b), para $(n = 2, m = 1)$. Nas duas Figs., usamos $\phi = 0.5 (h/e)$ e $B = 15$ Tesla.	70
6.4	Espectro de energia em função da rotação para alguns valores de n e m . Consideramos $\phi = 0.5(h/e)$ e $B = 15$ Tesla.	72
6.5	Esboço da absorção e índice de refração em função da energia do fóton. Em (a), temos o coeficiente de absorção linear (linha sólida), não linear de terceira ordem (linha pontilhada) e total (linha tracejada). Em (b), temos o índice de refração linear (linha sólida), não linear de terceira ordem (linha pontilhada) e total (linha tracejada). As curvas com suas respectivas cores referem-se aos valores de rotações considerados.	73
6.6	Esboço da absorção e índice de refração em função da energia do fóton. Usamos os mesmos parâmetros da Fig. 6.5, mas agora considerando rotações negativas. Em ambas as figuras, usamos $\phi = 0.5 (h/e)$ e $B = 15$ Tesla.	74
B.1	Primeira página do artigo "Bound states for the spin-1/2 Aharonov-Bohm problem in a rotating frame.	121
B.2	Primeira página do artigo "Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum ring under rotating effects.	122

Sumário

Lista de Figuras	1
Sumário	3
1 Introdução	6
2 Efeito Aharonov-Bohm	12
2.1 Transformações de calibre	13
2.2 Efeito Aharonov-Bohm	15
2.2.1 O efeito Aharonov-Bohm elétrico	15
2.2.2 Efeito Aharonov-Bohm magnético	18
2.2.3 Interpretações físicas do efeito Aharonov-Bohm e experimentos	20
2.2.4 Topologia, geometria diferencial e o efeito Aharonov-Bohm	22
3 Mecânica quântica em referenciais não inerciais	24
3.1 Partículas com spin-1/2 em referenciais não inerciais	25
3.2 Equação de Pauli-Schrödinger em um referencial girante	29
4 Estados ligados para o problema de Aharonov-Bohm para partícula de Spin-1/2 em um referencial girante	32
4.1 A equação de movimento	32
4.2 Extensões auto-adjuntas de operadores e o Método de Kay-Studer	35
4.2.1 O método de extensão auto-adjunta	36
4.3 O Método de Kay e Studer	39
4.4 Solução utilizando extensões auto-adjuntas	39
4.5 Análise numérica e discussão dos resultados	43
5 Óptica não linear	47

5.1	Tensor susceptibilidade não linear	48
5.2	Teoria quântica da susceptibilidade não linear	51
5.2.1	Matriz densidade	52
5.2.2	Interação entre um sistema de dois níveis e a luz	54
5.2.3	Coefficiente de absorção e mudança do índice de refração	62
6	Propriedades ópticas de um anel quântico bidimensional em um referencial girando	65
6.1	Equação de movimento	65
6.2	Análise numérica dos resultados	68
7	Conclusão	76
A	Geometria diferencial e topologia	79
A.1	Espaços topológicos	79
A.2	Variedades diferenciáveis	81
A.2.1	Vetores tangentes, formas e tensores	84
A.2.2	Vetores cotangentes	86
A.2.3	Tensores	87
A.2.4	Campos vetoriais e tensoriais	88
A.2.5	Mapa diferencial entre variedades. Pullback e Pushforward	88
A.2.6	Fluxo induzido por um campo vetorial	89
A.2.7	Derivadas de Lie	91
A.2.8	Formas diferenciais	93
A.2.9	Grupos e álgebra de Lie	95
A.2.10	Álgebra de Lie	96
A.2.11	O Subgrupo uniparamétrico	98
A.2.12	Constantes de estrutura da álgebra de Lie	99
A.2.13	Constantes de estrutura da álgebra de Lie	100
A.2.14	Ações de grupos de Lie em variedades	101
A.2.15	Campos vetoriais induzidos	102
A.2.16	Representação adjunta	102
A.3	Fibrados	103

A.4	Conexões em Fibrados e Teoria de Calibre	107
A.5	Conexões em Fibrados e Teoria de Calibre	108
A.5.1	1-forma de conexão local e potenciais de calibre	110
A.5.2	Levantamento horizontal e transporte paralelo	111
A.5.3	Holonomia	112
A.6	Curvatura	113
A.6.1	Derivada covariante em fibrados principais	113
A.6.2	Curvatura	113
A.6.3	Forma local da curvatura	114
A.6.4	Identidade de Bianchi	115
A.6.5	Derivada covariante em fibrados vetoriais associados	116
A.6.6	Expressão local para uma derivada covariante	117
B	Artigos publicados	120
	Referências Bibliográficas	123

Nos últimos anos, as nanoestruturas semicondutoras, em particular os anéis quânticos, têm sido objeto de intensa investigação tanto por seu interesse teórico quanto por suas promissoras aplicações. Os anéis quânticos são nanoestruturas circulares ou anelares que apresentam propriedades ópticas e eletrônicas interessantes resultantes do confinamento de portadores de carga em duas dimensões.

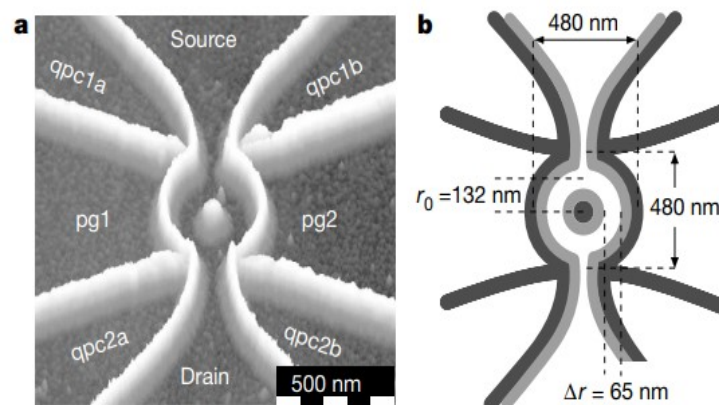


Figura 1.1: a) Micrografia do anel tirada com AFM após a gravação da estrutura. b) Esboço esquemático do anel [1].

Alguns exemplos dessas aplicações incluem o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos,

optoeletrônicos e em spintrônica [2–7]. O confinamento proporcionado por esses anéis resulta em níveis de energia bem definidos e estados de spin de elétrons estáveis, minimizando interações com o ambiente e mecanismos de flip de spin. Isso leva a tempos de coerência relativamente longos, tornando-os candidatos promissores para a produção de qubits de estado sólido com tempos de decoerência suficientes para a implementação de dispositivos utilizados em computação e informação quântica. [8] Além das aplicações tecnológicas, os anéis quânticos também despertam interesse teórico devido a fenômenos como o efeito AB [9] e correntes persistentes, que surgem do confinamento quântico de portadores de carga e da quantização de fluxos magnéticos em estruturas anelares[10–13].

O efeito Aharonov-Bohm (AB) [9] é um fenômeno quântico intrigante que desafia nossa compreensão tradicional da interação entre partículas carregadas e campos eletromagnéticos. Ele demonstra que a presença de um campo magnético, mesmo em regiões onde a intensidade do campo é zero, pode afetar o comportamento de partículas carregadas, como elétrons. Esse efeito é observado quando as partículas percorrem trajetórias ao redor de uma região onde um campo magnético está presente, mas sem realmente entrar nessa região. Durante esse movimento, a partícula adquire uma fase adicional em sua função de onda, o que pode levar a padrões de interferência observáveis, mesmo sem uma força magnética direta sobre a partícula. A compreensão deste fenômeno tem gerado debates sobre os fundamentos da mecânica quântica, especialmente em relação ao papel dos potenciais eletromagnéticos e à questão da não localidade [14].

Além de ser observado nos anéis quânticos, outros experimentos já haviam comprovado a existência do efeito AB. Nesse ponto, vale a pena observar que, em seu famoso manuscrito, Aharonov e Bohm propuseram dois tipos de experimentos, consistindo em um efeito AB magnético e sua contraparte elétrica. Apesar disso, a versão magnética atraiu mais atenção. Portanto, nesta tese, usaremos o “efeito AB” para nos referirmos à sua versão magnética.

O efeito AB pode ser interpretado como uma fase geométrica que surge em partículas confinadas a topologias não triviais, o que faz com que este fenômeno esteja presente em vários campos de pesquisa, e vários efeitos análogos tenham sido propostos. Por exemplo, Aharonov e Casher [15] previram que é possível obter uma fase quântica para uma partícula neutra que tenha um momento magnético. Nesse caso, há um campo elétrico devido a uma linha de carga, mas não há força agindo sobre a partícula. Esse efeito é conhecido como efeito ”Aharonov-

Casher”. Da mesma forma, uma partícula obrigada a se mover em uma região na qual não há curvatura pode ser influenciada por efeitos de curvatura provenientes de uma região inacessível a ela, o que corresponde a uma versão de um análogo gravitacional [16, 17]. Outras versões de análogos gravitacionais também foram investigadas [18]. Outro exemplo de efeito análogo consiste em um efeito hidrodinâmico, no qual as ondas sonoras são espalhadas por um vórtice quantizado em um hélio superfluido [19]. Além disso, há um análogo óptico no contexto de metamateriais [20] e um análogo fotônico, que surge das interações fóton-fônon [21]. Uma versão do efeito AB para campos não abelianos também foi apresentada [22].

O estudo do efeito AB não está restrito ao caso de estados quânticos de espalhamento e experimentos de interferometria. A influência de um fluxo eletromagnético também pode afetar uma partícula quântica no caso de estados ligados. Pode-se dizer que a presença de um fluxo magnético, por exemplo, pode afetar os autovalores de energia de uma partícula para estados ligados, mesmo que não haja um campo eletromagnético agindo sobre esses estados de energia [23]. O efeito AB para estados ligados foi analisado em muitos cenários diferentes. Por exemplo, ele pode ocorrer em anéis de grafeno [24], afetando sua degenerescência de vale [25]. Em nanotubos de carbono, o efeito AB também pode estar relacionado a estruturas de excitons [26].

Apesar de o efeito AB ter sido originalmente pensado para elétrons, a influência que o spin da partícula poderia ter só foi estudada anos mais tarde. Em uma sequência de trabalhos pioneiros, Hagen demonstrou que é necessário levar em conta o surgimento de um termo Zeeman contendo uma interação δ quando o grau de liberdade de spin está presente [27–29]. Esse tipo de interação modifica o Hamiltoniano, introduzindo uma singularidade. Portanto, é necessário empregar técnicas apropriadas para lidar com ela. Podemos usar o método de extensões auto-adjuntas para tratar esse problema [30, 31].

Em referenciais não inerciais, as leis convencionais da física, estabelecidas em referenciais inerciais, sofrem modificações devido à presença de acelerações ou rotações. Essas modificações introduzem fenômenos únicos e abrem novos caminhos para investigar a interação entre a mecânica quântica e o movimento. Por exemplo, em referenciais acelerados, o efeito Unruh [32] prevê que um observador perceberá um banho térmico de partículas mesmo no espaço vazio, um efeito semelhante à radiação Hawking em buracos negros. Isso implica que o simples fato de um observador estar acelerado pode dar origem a consequências observáveis em sistemas

quânticos. A investigação dos efeitos de rotação na mecânica quântica tem um longo histórico de pesquisas extensas. Tsai e Neilson [33] também mostraram que o efeito de interferência quântica em referenciais rotativos é análogo ao conhecido como efeito Aharonov-Bohm (AB) [9]. Obter uma compreensão mais profunda de como a rotação influencia os sistemas quânticos oferece percepções valiosas sobre o comportamento fundamental das partículas. No entanto, a investigação dos efeitos rotacionais em sistemas como anéis quânticos é um tópico recente. Investigações analíticas abordaram recentemente os efeitos rotacionais em sistemas de anéis quânticos [10, 34]. Além disso, investigações numéricas recentes mostraram efeitos rotacionais notáveis em estados eletrônicos, correntes persistentes e magnetização em anéis quânticos [11, 12]. Em geral, o impacto da rotação no estudo de anéis quânticos tem implicações interessantes nos níveis de energia e no comportamento quântico fundamental do sistema, como mudanças nos estados fundamentais [10–12, 34]. Portanto, o estudo da distribuição espacial das partículas e das propriedades ópticas dos anéis quânticos sob efeitos de rotação ainda é um tópico em aberto. Futuras investigações sobre esse tópico avançam nosso entendimento teórico e são promissoras para o progresso de áreas como a óptica quântica, a optoeletrônica e suas aplicações. Além disso, atualmente, o maior desafio da física é a formulação de uma teoria quântica da gravidade. A maior dificuldade para atingir esse objetivo é a falta de testes experimentais que possam orientar os físicos. Estima-se que a detecção direta da gravidade quântica deva ocorrer em escalas de comprimento e energia próximas à escala de Planck, algo ainda distante do alcance de nossa tecnologia atual. Uma alternativa mais factível é realizar experimentos com sistemas quânticos em escalas de energia menores em referenciais não inerciais e campos gravitacionais e tentar obter evidências da estrutura quântica do espaço-tempo de maneira indireta. Pioneiros nesse sentido, experimentos de interferometria com nêutrons detectaram a influência da gravidade nos padrões de interferência destas partículas [35–37]. A pesquisa por assinaturas de gravidade quântica em campos fracos e em referenciais não inerciais se tornou um campo de pesquisa bastante ativo e interessante e motivam o estudo de sistemas quânticos nestes cenários [38, 39, 39–48, 48–52].

A óptica não linear é um ramo da física que estuda materiais nos quais a resposta a luz é não linear, ou seja não é proporcional ao campo elétrico incidente [53–57]. Em vez disso, esses materiais exibem fenômenos ópticos não lineares, nos quais as respostas do material são mais complexas e resultam em uma variedade de efeitos como geração de harmônicos, mistura

de frequências, soma e subtração de frequências, entre outros. A óptica não linear tem seu início na década de 1960, com a criação do laser, e desde então esse campo se tornou foco de intensa pesquisa teórica e experimental devido ao reconhecimento de que esses fenômenos podem ter muitas utilidades práticas; por exemplo, a dobra de frequência permite a geração de luz coerente em comprimentos de onda diferentes dos lasers disponíveis [53–56].

Nanoestruturas semicondutoras também exibem propriedades ópticas não lineares, como pode ser demonstrado pelo cálculo de coeficientes de absorção óptica (do inglês OAC's) e mudanças no índice de refração (do inglês, RIC's). Tais propriedades ópticas sofrem influências do confinamento dos portadores de carga e da geometria dessas estruturas, o que torna esses materiais candidatos a possíveis aplicações inovadoras. Em particular para anéis quânticos, podemos citar o estudo dos efeitos sobre as propriedades ópticas de pontos quânticos cilíndricos influenciados pela temperatura e pressão [58], o cálculo das propriedades ópticas de pontos quânticos esféricos com potenciais de confinamento combinados [59] e a pesquisa das propriedades ópticas do disco quântico com distorção azimutal que podem ser úteis em dispositivos optoeletrônicos [60] e fotônicos [61].

Neste trabalho, vamos estudar dois tipos de sistemas em referenciais não inerciais. O primeiro é o problema de AB para estados ligados em um referencial girante; no segundo, estudamos as propriedades ópticas não lineares de um anel quântico semicondutor também em um referencial girante. Nosso estudo é original, pois, até onde sabemos, não há trabalhos anteriores que abordem esses sistemas específicos nas condições mencionadas, proporcionando uma nova perspectiva sobre as dinâmicas e características destes sistemas em referenciais girantes. No capítulo 2, faremos uma revisão do efeito AB, passando por sua história, discussões acerca do seu significado e uma interpretação matemática usando topologia e geometria diferencial. No capítulo 3, estudaremos a mecânica quântica de partículas com spin em um referencial não inercial. Partiremos da equação de Dirac em um referencial não inercial e chegaremos à equação de Pauli-Schrödinger, utilizando o método de Foldy-Wouthuysen-Tani. Estes resultados serão utilizados no capítulo 4, para estudar o espectro de energia de uma partícula confinada em um potencial de AB em um referencial não inercial. Veremos que a inclusão do grau de liberdade de spin da partícula resulta na adição de um termo singular no Hamiltoniano; vamos utilizar o método de extensão auto-adjunta para regularizá-lo. Em seguida, no capítulo 5, faremos uma breve revisão de óptica não linear. Apresentaremos um pouco do formalismo do operador

densidade na mecânica, que utilizaremos no cálculo das susceptibilidades ópticas não lineares de um sistema de dois níveis interagindo com um campo elétrico intenso. De posse das susceptibilidades, poderemos obter as mudanças no índice de refração e os coeficientes de absorção lineares e não lineares do sistema. Depois, no capítulo 6, iremos calcular os RIC's e OAC's de um anel quântico bidimensional sob o efeito de um potencial de AB em um referencial não inercial. No último capítulo apresentamos as conclusões.

Efeito Aharonov-Bohm

Na mecânica quântica, a presença dos potenciais escalar e vetorial (denotados como ϕ e \mathbf{A} , respectivamente) é essencial de uma forma que não é necessária na física clássica. Na física clássica, eles são apenas ferramentas matemáticas para calcular as quantidades física de interesse, os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} ; porém, na mecânica quântica esses potenciais aparecem explicitamente na equação de Schrödinger. No entanto, as transformações de calibre aplicadas aos potenciais se combinam com as transformações de fase locais da função de onda quântica e a teoria permanece invariante sob estas transformações. Porém, em 1959 [9], Aharonov e Bohm, elaboraram dois experimentos mentais para mostrar que a inevitável presença dos potenciais na formulação matemática da mecânica quântica poderia ter consequências físicas surpreendentes. Em tais experimentos, as partículas carregadas poderiam ser afetadas pelos potenciais mesmo quando se move por regiões onde \mathbf{E} e \mathbf{B} são nulos. Este fenômeno ficou conhecido como efeito AB. A questão que fica é: Quantidades que são invariantes de calibre podem conter algum significado físico? Antes de aprofundarmos-nos nesta questão vamos discutir os potenciais, as transformações de calibre e como eles são incorporados à mecânica quântica via acoplamento mínimo.

2.1 Transformações de calibre

Os potenciais elétricos e magnéticos não são univocamente definidos e podemos alterá-los desde que resultem nos mesmos campos observados. A este tipo de transformação, damos o nome de *transformações de calibre*; a esta parcial arbitrariedade de escolha dos potenciais dá-se o nome de liberdade de calibre. Tendo sido surgido como forma de simplificar equações no eletromagnetismo, a invariância de calibre tem um papel fundamental na mecânica quântica, no Modelo Padrão da física de partículas. Além disso, é parte importante da controvérsia que envolve o efeito AB. Nesta seção, vamos fazer uma breve revisão da eletrodinâmica clássica e dos potenciais antes de nos aprofundarmos no efeito Aharonov-Bohm.

Tais transformações assumem significados distintos na eletrodinâmica clássica e na mecânica quântica. Na eletrodinâmica clássica, essas transformações são simplesmente redefinições dos potenciais eletromagnéticos que não afetam os campos elétrico e magnético observados. Elas refletem a liberdade de escolha na descrição do campo eletromagnético, permitindo selecionar uma formulação conveniente para resolver problemas específicos. Por outro lado, na mecânica quântica, as transformações de calibre têm implicações mais profundas. Elas não apenas representam diferentes descrições dos potenciais, mas também influenciam diretamente as propriedades físicas.

A eletrodinâmica clássica é descrita pelas quatro equações de Maxwell [62]

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2.4)$$

que estabelecem as relações entre os campos elétricos e magnéticos e suas fontes, as densidades de cargas ρ e as densidades de correntes \mathbf{J} , pela equação de continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.5)$$

pela força de Lorentz

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (2.6)$$

que rege o movimento de cargas de prova sob a ação de campos eletromagnéticos. Estas equações contém os princípios da eletrodinâmica clássica (no vácuo). É conveniente, em muitos

casos, introduzir os potenciais escalar ϕ e vetorial \mathbf{A} . Reescrevendo os campos em função dos potenciais, temos

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}. \quad (2.8)$$

Os potenciais escalar e vetorial simplificam bastante os cálculos no eletromagnetismo clássico; em vez de calcular as seis componentes dos vetores \mathbf{E} e \mathbf{B} , calculamos as quatro componentes de ϕ e \mathbf{A} e depois obtemos os campos através de derivadas. Também, podemos chegar a (2.6) derivando as equações de Hamilton do Hamiltoniano [63]

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\phi, \quad (2.9)$$

Esses potenciais não são determinados de maneira unívoca. Os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} não mudam com as transformações

$$\phi' \rightarrow \phi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\Lambda, \quad (2.10)$$

onde Λ é uma função arbitrária da posição e do tempo. Estas transformações nos potenciais são chamadas de *transformações de calibre*. Devido a esta arbitrariedade na escolha dos potenciais, diz-se que apenas que os campos possuem significado físico e os potenciais (grandezas que não podem ser medidas diretamente) são apenas quantidades matemáticas auxiliares para obter os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} , que são as quantidades dotadas de realidade física. Na mecânica clássica descrever o movimento de uma partícula sujeita a campos eletromagnéticos a partir de (2.6) ou (2.9) é uma questão de conveniência.

Por outro lado, o uso dos potenciais é necessário na teoria quântica, já que devemos partir de um Hamiltoniano. A dinâmica quântica de uma partícula é descrita pela equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad (2.11)$$

onde o Hamiltoniano (2.9) agora representa o operador Hamiltoniano \hat{H} , e $\psi(x, t)$ é a função de onda da partícula. Deste modo, a equação de movimento para uma partícula carregada de massa m e carga e em um campo magnético externo é dada por

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\phi \right] \psi. \quad (2.12)$$

Portanto, na mecânica quântica quem aparece explicitamente na equação de movimento são os potenciais ϕ e \mathbf{A} , e não os campos \mathbf{B} e \mathbf{E} . Porém, a mecânica quântica ainda é invariante de

calibre. Se aplicarmos as transformações (2.10) em (2.12), obteremos uma função de onda para o Hamiltoniano transformado que difere apenas por uma fase de $\psi(x, t)$ dada por

$$\psi'(x, t) \rightarrow \psi(x, t)e^{i\frac{\Lambda(x, t)}{\hbar c}}. \quad (2.13)$$

Tais transformações são chamadas de *transformações de fase locais*, e não alteram a probabilidade nem os valores esperados. Assim, podemos dizer que $\psi(x, t)$ e $\psi'(x, t)$ são fisicamente equivalentes. Deste modo, podemos afirmar que a teoria é invariante sob transformações de calibre. Devido a sua origem clássica, seria natural supor que a invariância de calibre no contexto quântico representa apenas a noção de que apenas os campos, mas não os potenciais, tem significado físico.

2.2 Efeito Aharonov-Bohm

Foi visto na seção anterior que os potenciais no eletromagnetismo clássico são quantidades matemáticas auxiliares opcionais no electromagnetismo clássico, mas são indispensáveis na mecânica quântica, já que aparecem explicitamente na equação de movimento. Entretanto, eles não podem ser observados diretamente e as transformações de calibre apenas adicionam uma de fase na função de onda.

Esta situação intrigou David Bohm. Ele acreditava que essas peculiaridades dos potenciais na mecânica quântica representavam uma falha na teoria. Em 1959, ele e seu aluno de doutorado Yakir Aharonov, em um artigo de grande influência, propuseram experimentos para demonstrar que na mecânica quântica os potenciais ϕ e \mathbf{A} parecem influenciar o movimento de uma partícula carregada mesmo em uma região onde os campos elétrico e magnético são nulos. Este efeito puramente quântico ficou conhecido como efeito AB [9], em homenagem aos dois pesquisadores.

2.2.1 O efeito Aharonov-Bohm elétrico

O primeiro experimento proposto por Aharonov e Bohm para demonstrar a importância dos potenciais na mecânica quântica [9, 63, 64], consiste de um arranjo no qual um feixe coerente de elétrons é dividido em duas partes, cada uma das quais passando por um cilindro condutor, como é mostrado na Fig. 2.1. Estes cilindros funcionam como gaiolas de Faraday, mantendo os feixes completamente isolados de campos elétricos externos. Quando os feixes

estão completamente dentro dos cilindros, voltagens $V_D(t) = e/(\hbar\phi_D(t))$ e $V_E(t) = e\hbar\phi_E(t)$ são aplicadas no cilindro direito e esquerdo, respectivamente, durante o intervalo em que os elétrons viajam dentro deles. Antes que os feixes deixem os tubos, as voltagens são desligadas. Por fim, os feixes são reunidos novamente, formando um padrão de interferência em uma tela. O objetivo deste arranjo é garantir que os pacotes de onda sejam submetidos aos potenciais sem nunca entrarem em contato com campos elétricos. A equação de Schrödinger dos elétrons que

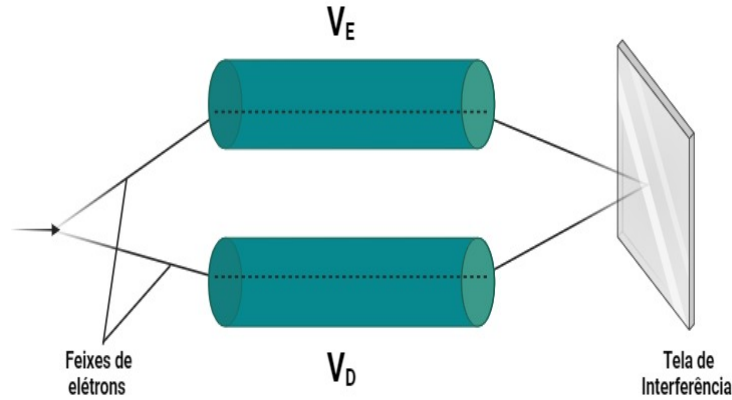


Figura 2.1: Esquema ilustrativo do efeito AB elétrico. Um feixe de elétrons é dividido, guiado através de duas caixas metálicas, que funcionam como gaiolas de Faraday, e finalmente os feixes são reunidos formando um padrão de interferência numa tela. O padrão de interferência na tela depende dos potenciais, mesmo que os elétrons se propaguem em regiões em que o campo elétrico é nulo.

passam no cilindro esquerdo é escrita como

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_E}{\partial t} &= H_E\psi_E, \\ &= [H_0 + V_E(t)]\psi_E, \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde H_0 é o Hamiltoniano na ausência dos potenciais. Se $\psi_E^0(\mathbf{x}, t)$ é a solução de H_0 , então a solução de (2.14) é

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = \psi_E^0 e^{iS_E}(\mathbf{x}, t), \quad (2.15)$$

que difere da solução na ausência de potenciais pelo fator de fase $S_E = \frac{e}{\hbar} \int \phi dt$. Analogamente, a equação de Schrödinger para o pacote de onda que passa pelo cilindro do lado direito é dada

por

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_D}{\partial t} &= H_D \psi_E \\ &= [H_0 + V_D(t)] \psi_D, \end{aligned} \quad (2.16)$$

e sua solução é escrita como $\psi_D(\mathbf{x}, t) = \psi_D^0 e^{iS_D}(\mathbf{x}, t)$, que difere da solução da equação de movimento com o Hamiltoniano livre de potenciais, representada por $\psi_D^0(\mathbf{x}, t)$, e com um fator de fase $S_D = \frac{e}{\hbar} \int \phi dt$.

Se os pacotes de onda entram nos cilindros em uma superposição $\psi = (\psi_E^0 + \psi_D^0)/\sqrt{2}$, eles deixam o cilindro em uma superposição

$$\psi = (\psi_E^0 e^{iS_E} + \psi_D^0 e^{iS_D})/\sqrt{2}. \quad (2.17)$$

Neste caso, a diferença de fase é dada por

$$\delta\varphi = S_E - S_D, \quad (2.18)$$

$$= \frac{et\Delta\phi}{\hbar}, \quad (2.19)$$

onde t é o tempo necessário para que os feixes atravessem os cilindros. Como consequência, observamos um deslocamento nas linhas do padrão de interferência a partir das posições quando não há diferença de potencial. Este é um resultado surpreendente: ainda que os elétrons não tenham passado por regiões em que houvesse campo elétrico, seu movimento foi afetado pela presença do potencial. O efeito é, obviamente, puramente quântico, já que ele só pode ser observado em um experimento de interferência.

Podemos ainda interpretar as integrais S_E e S_D como integrais de caminho ao longo de trajetórias no espaço-tempo, e a diferença de fase como uma integral ao longo de um caminho fechado no espaço-tempo

$$\frac{e}{\hbar} \oint \phi dt. \quad (2.20)$$

A generalização relativística de (2.20) é

$$\frac{e}{\hbar} \oint \left(\phi dt - \frac{\mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}}{c} \right), \quad (2.21)$$

onde a integral de caminho é realizada ao longo de um circuito fechado no espaço-tempo. A partir desta generalização, é legítimo pensar que deve existir um efeito análogo para o caso de um potencial vetor na ausência de um campo magnético. Este caso foi proposto por Aharonov e Bohm no mesmo artigo, e será discutido na próxima seção.

2.2.2 Efeito Aharonov-Bohm magnético

A seguir, analisamos o efeito AB magnético [63–66]. Este caso é o mais conhecido e, na maioria dos tratamentos encontrados na literatura, ele é apresentado como a única versão do efeito AB.

O arranjo experimental proposto tem como base um experimento de fenda dupla. Uma fonte emite um feixe coerente de elétrons que é dividido em duas partes, cada uma passando por uma das fendas (veja a Fig. 2.2). Atrás do anteparo entre as duas fendas, é posicionado um solenoide longo de raio R perpendicularmente ao plano da figura, de modo que um campo magnético \mathbf{B} na direção z é criado no interior do solenoide, enquanto na região exterior o campo é nulo. Além disso, podemos cercá-lo com um escudo cilíndrico impenetrável para as partículas. Desta forma, os elétrons não entram em contato com o campo. No entanto, o potencial vetor \mathbf{A} não é nulo. Em coordenadas cilíndricas, as componentes do potencial vetor são dadas por

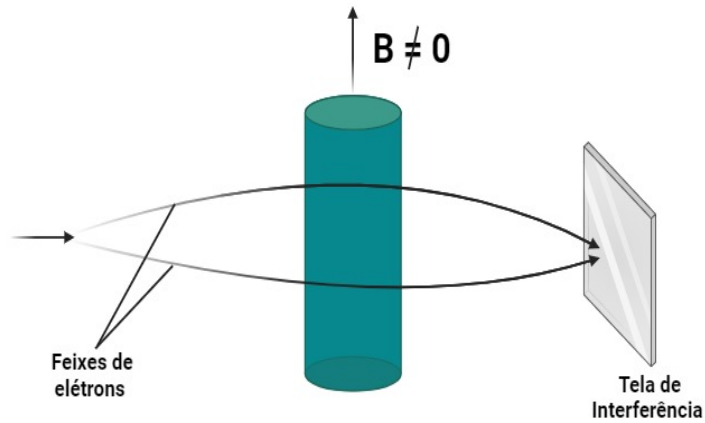


Figura 2.2: Esquema ilustrativo do efeito AB magnético. Um feixe de elétrons é dividido em dois, cada um passando ao lado de um solenoide com um campo magnético em seu interior. O padrão de interferência das partículas depende do fluxo magnético do solenoide, mesmo que os elétrons se propaguem por regiões onde o campo magnético é nulo.

$$\begin{aligned} A_r = A_z = 0, \\ A_\varphi = \frac{Br}{2} \end{aligned} \quad \text{Dentro do solenoide,} \quad (2.22)$$

e

$$\begin{aligned} A_r = A_z = 0, \\ A_\varphi = \frac{BR^2}{2r} \end{aligned} \quad \text{Fora do solenoide.} \quad (2.23)$$

O campo magnético é obtido diretamente usando a relação $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, e é dado por

$$\begin{aligned} B_r = B_z = 0, \\ B_\varphi = B, \end{aligned} \quad \text{(Dentro do solenoide)} \quad (2.24)$$

e

$$\mathbf{B} = 0. \quad \text{(Fora do solenoide)} \quad (2.25)$$

Veja a figura abaixo 2.3.

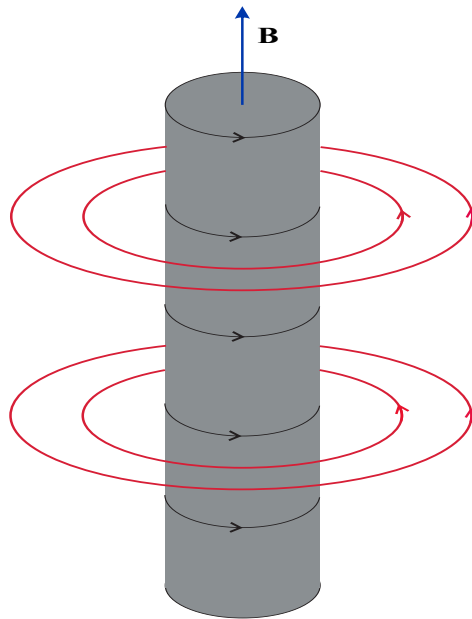


Figura 2.3: Figura esquemática representado as linhas de campo e potencial magnéticos criados no solenoide.

Por fim, os feixes são combinados na tela para formar um padrão de interferência.

Para o feixe que passa na fenda à esquerda, $\psi_E = \psi_E^0 e^{iS_E}$, onde ψ_E^0 é a solução para $\mathbf{A} = 0$, e $S_E = \frac{1}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$, com a integral tomada ao longo do caminho percorrido pelos elétrons, satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi_E. \quad (2.26)$$

Analogamente, para o lado direito, a função de onda é escrita como $\psi_D = \psi_D^0 e^{iS_D}$, e satisfaz a

equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_D(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi_D, \quad (2.27)$$

onde $S_D = \frac{1}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$. O padrão de interferência depende da diferença de fase $\delta\phi = S_E - S_D$, que é equivalente a uma integral de caminho ao longo de um caminho fechado C que envolve o solenoide, e pode ser calculada como

$$\begin{aligned} \delta\phi &= \frac{e}{\hbar} \left(\int_{C_E} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} - \int_{C_D} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right), \\ &= \frac{e}{\hbar} \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}, \\ &= \frac{e}{\hbar} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e\phi}{\hbar}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

O resultado (2.28) nos diz que a diferença de fase entre os feixes será determinada pelo fluxo magnético dentro do solenoide. Qualquer alteração no campo magnético do solenoide resultará em uma mudança no padrão de interferência observado. Esse fenômeno é conhecido como o efeito AB magnético, onde um campo magnético que não interage diretamente com as partículas produz uma mudança mensurável em seu comportamento. Isso levanta questões sobre a natureza da interação entre campos e partículas, sugerindo que os potenciais podem ser mais fundamentais do que os próprios campos. Na próxima seção, fazemos uma breve revisão das interpretações do efeito AB e dos experimentos realizados para confirmar sua existência.

2.2.3 Interpretações físicas do efeito Aharonov-Bohm e experimentos

Desde sua publicação, o artigo de Aharonov e Bohm recebeu muita atenção por se tratar de um fenômeno intrigante, que questiona aspectos fundamentais da mecânica quântica. A existência do efeito não foi amplamente aceita logo de início e seu significado foi e ainda é bastante discutido [67–79, 79, 79–81, 81–83]. O efeito consiste na produção de uma mudança de fase relativa entre dois feixes de elétrons envolvendo um tubo de fluxo magnético, mesmo que os elétrons estejam totalmente excluídos da região em que o campo magnético está confinado. Duas interpretações para esse efeito são possíveis:

- Os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} são as únicas quantidades físicas relevantes, mas interagem de forma não local com as partículas;

- Os feixes não são afetados pelos campos, já que estes não interagem localmente. Em vez disso, eles são afetados localmente pelos potenciais ϕ e \mathbf{A} , os quais deixam de ser apenas quantidades matemáticas e adquirem status de grandeza física.

Aceitar a hipótese de interação não local entre campos e partículas significava ignorar o conceito relativístico de localidade, o que foi rechaçado por Aharonov e Bohm. Concluíram então que os feixes de elétrons interagem localmente com potenciais e que os mesmos devem ser tomados como grandezas físicas mais fundamentais que os campos. Essa interpretação foi endossada e muito divulgada por Feynman, Leighton e Sands [84], que na famosa coleção de livros didáticos “Lições de Física” apresentam o efeito AB como evidência da realidade física dos potenciais. Em meados da década de 1970, o interesse foi renovado no significado físico do efeito AB, especialmente à luz do desenvolvimento da teoria dos campos de calibre proposta em 1954 por Yang e Mills [85] e em 1956 por Utiyama [86], muito por conta da unificação bem-sucedida do eletromagnetismo e da força fraca por Weinberg e Salam, o que dava ainda mais importância aos potenciais. Nesse contexto, Wu e Yang [87] propuseram uma extensão do efeito AB que poderia ser usada como um teste definitivo para a existência do campo de calibre de spin isotópico. Essa extensão do efeito AB foi concebida como um experimento em que um solenoide seria substituído por um cilindro girando em torno de seu eixo, feito de elementos pesados com um excesso de nêutrons. Esta proposta visava explorar a natureza do campo de calibre, cuja existência ainda não havia sido comprovada experimentalmente até aquele momento.

No entanto, a proposta de elevar os potenciais ao status de campos reais é confrontada com uma dificuldade. Estes campos são invariantes de calibre. Isto significa que os potenciais não são únicos e podem ser modificados utilizando funções escalares sem que os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} e, portanto, não podemos medir ϕ e \mathbf{A} . Assim, uma segunda possível interpretação para o efeito AB é considerar que os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} influenciam as cargas de forma não local. Vários autores deram suporte a esta ideia. Dewitt [88] propôs que a teoria que descreve a interação de partículas carregadas e campos eletromagnéticos poderia ser reformulada em termos apenas dos campos \mathbf{E} e \mathbf{B} tornando os potenciais dispensáveis. Mais tarde, até mesmo Aharonov adotou a interpretação de ação não local dos campos eletromagnéticos, abandonando a hipótese de que os potenciais possuem uma realidade física [89]. Em meio às controvérsias entre teóricos, experimentos realizados confirmavam a existência do efeito AB. O primeiro deles foi realizado por Chambers [90], em 1960, logo após a publicação do artigo de Aharonov e Bohm.

Outros experimentos com diferentes configurações foram realizados e continuaram a atestar a existência do fenômeno [91–93]. Ainda assim, alguns autores como Bocchieri e Loinger [73] ainda questionavam a existência do fenômeno do ponto de vista teórico e experimental. Entre outros argumentos, os autores alegaram que os elétrons não estavam totalmente protegidos dos campos. Para pacificar a questão, Tonomura et al. [94, 95] usaram um campo magnético confinado em solenoide toroidal revestido por um supercondutor, evitando qualquer fuga de campo magnético. Uma revisão completa da longa história de debates e experimentos envolvendo o efeito AB deixaria o texto longo e fora do escopo deste trabalho. Por este motivo, recomendamos a leitura do trabalho de revisão realizado por Peshkin e Tonomura [96].

2.2.4 Topologia, geometria diferencial e o efeito Aharonov-Bohm

Nesta seção, vamos analisar o efeito AB do ponto de vista da teoria de conexões em fibrados principais (ver apêndice A). Esta é uma abordagem interessante para se estudar o efeito, pois a diferença de fase surge de maneira bastante natural.

Como podemos descrever o efeito AB geometricamente? O sistema pode ser considerado como essencialmente bidimensional, já que há uma simetria ao longo do eixo do solenoide. Portanto, podemos considerar que o feixe de elétrons está em um plano bidimensional com a origem removida, $M = \mathbb{R} - \{0\}$. O grupo de calibre do eletromagnetismo é o grupo $U(1)$ de matrizes unitárias de ordem 1. Portanto, o fibrado principal de interesse é $P(M, U(1))$, onde M é a variedade de base e o grupo $U(1)$ é o grupo estrutural e seus elementos formam a fibra. O outro fibrado de interesse é o fibrado vetorial associado $E = P \times_{U(1)} \mathbb{C}$, onde $U(1)$ age em \mathbb{C} como o grupo de rotações. O fibrado E é um fibrado de linha complexa sobre M , e as seções σ desse fibrado estão relacionadas às funções de onda ψ .

Definimos uma 1-forma com valores na álgebra de Lie $\mathcal{A} = iA = iA_\mu dx^\mu$. A derivada covariante associada com esta conexão local é $\mathcal{D} = d + \mathcal{A}$, onde \mathcal{A} é dado por 2.23. Já que $d\mathcal{A} = \mathcal{F} = 0$, essa conexão é localmente plana. Vamos considerar o círculo unitário S^1 que envolve o solenoide na origem. Parametrizamos S^1 como $e^{i\theta}$ $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e escrevemos a conexão em S^1 como

$$\mathcal{A} = i \frac{\Phi}{2\pi} d\theta. \quad (2.29)$$

A equação acima é obtida de fazendo $r = 1$. A função é transportada paralelamente ao longo

de S^1 . Assim, temos a equação diferencial

$$\mathcal{D}\psi(\theta) = \left(d + i \frac{\Phi}{2\pi} d\theta \right) \psi(\theta) = 0, \quad (2.30)$$

cujas soluções são

$$\psi(\theta) = \theta_0 e^{-i \frac{\Phi}{2\pi} \theta}, \quad (2.31)$$

onde θ_0 é uma constante. A função de onda - um ponto da fibra - é transportada paralelamente ao longo do círculo na base por $\theta : 0 \rightarrow 2\pi$ como

$$\psi(0) \mapsto \psi(0) e^{i\theta}. \quad (2.32)$$

A curva na fibra correspondente não fecha, e a holonomia ocorre. Então, geometricamente, a função de onda corresponde a uma holonomia no fibrado.

Mecânica quântica em referenciais não inerciais

Na mecânica clássica, é muitas vezes mais conveniente, ou até mesmo necessário, escolher sistemas de referência não inerciais para descrever o movimento de uma partícula. Quando usamos um referencial fixo na Terra para descrever o movimento de uma partícula, em alguns casos, é preciso levar em consideração que ela está acelerando em sua órbita e girando em seu eixo. Portanto, o referencial da Terra é não inercial e muitos efeitos importantes surgem da natureza não inercial do sistema de coordenadas da Terra. Por exemplo, os efeitos da força de Coriolis são evidentes em sistemas meteorológicos e na trajetória de projéteis. Além disso, o efeito centrífugo, que também resulta da rotação da Terra, faz com que objetos pesem ligeiramente menos no equador comparado aos polos. Outro exemplo é encontrado no movimento de satélites, onde é necessário usar referenciais não inerciais para calcular corretamente suas órbitas e corrigir suas trajetórias, considerando a rotação da Terra e as variações de gravidade. Sistemas de navegação, como o GPS, também dependem de cálculos que levam em conta a natureza não inercial do referencial terrestre para fornecer localizações precisas [97–100].

Da mesma forma, surgem efeitos interessantes quando analisamos sistemas quânticos em referenciais não inerciais. Em particular para a rotação, podemos citar como exemplo uma mudança na fase de nêutrons em experimentos de interferência devido à rotação da Terra detectada por Colella, Overhauser, e [35, 36, 101]. No contexto de anéis quânticos, trabalhos recentes revelam a influência da rotação em níveis de energia, correntes persistentes e magne-

tização.

Neste capítulo, vamos tratar do movimento de partículas de spin-1/2 em referenciais girantes. Começamos a partir do caso geral da equação de Dirac covariante sujeita a efeitos de aceleração e rotação, para em seguida nos concentrarmos no limite não relativístico em um referencial girante.

3.1 Partículas com spin-1/2 em referenciais não inerciais

Nesta seção, estudamos a mecânica quântica de uma partícula de spin-1/2 em um referencial com rotação. Basicamente, seguimos o procedimento desenvolvido nas Refs. [102–104].

Partimos da equação de Dirac covariante

$$(i\gamma^\mu \nabla_\mu - m)\psi = 0, \quad (3.1)$$

onde ψ é uma função de onda espinorial de quatro componentes. A derivada covariante é definida como

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu, \quad (3.2)$$

onde a conexão afim espinorial Γ_μ é dada pela relação

$$\Gamma_\mu = -\frac{i}{4}\omega_{\hat{a}\hat{b}\nu}\sigma^{\hat{a}\hat{b}} = \frac{1}{8}\omega_{\hat{a}\hat{b}\nu}[\gamma^{\hat{a}}, \gamma^{\hat{b}}], \quad (3.3)$$

onde $\omega_{\hat{a}\hat{b}\nu}$ é a conexão de spin, $\sigma^{\hat{a}\hat{b}} = \frac{i}{4}[\gamma^{\hat{a}}, \gamma^{\hat{b}}]$ é a representação espinorial dos geradores das transformações de Lorentz e as matrizes $\gamma^{\hat{a}}$ são as matrizes de Dirac em coordenadas locais rotuladas por índices latinos, com $\hat{a} = 0, 1, 2, 3$. Elas estão relacionadas com as matrizes de Dirac γ^μ em coordenadas globais, rotuladas com índices gregos, com $\mu = 0, 1, 2, 3$, através dos vierbeins $e_{\hat{a}}{}^\mu$ pela fórmula

$$\gamma^{\hat{a}} = e_{\hat{a}}{}^\mu \gamma^\mu. \quad (3.4)$$

Os vierbeins são definidos como as matrizes de transformação entre as bases globais e as bases *tetradas*, que são um conjunto de bases ortonormais $\{e_{\hat{a}}\}$ definidas em cada ponto do espaço-tempo como

$$e_{\hat{a}} = e_{\hat{a}}{}^\mu e_\mu. \quad (3.5)$$

Os vierbeins inversos $e^{\hat{a}}{}_{\mu}$ são definidos como as matrizes inversas dos vierbeins, tal que

$$e^{\hat{a}}{}_{\mu}e_{\hat{a}}{}^{\nu} = \delta_{\mu}^{\nu}, \quad e^{\hat{a}}{}_{\mu}e_{\hat{b}}{}^{\mu} = \delta_{\hat{b}}^{\hat{a}}. \quad (3.6)$$

Se a variedade for localmente lorentziana, δ_{μ}^{ν} deve ser substituído pela métrica $\eta_{\hat{a}\hat{b}} = (+, -, -, -)$. Como são ortonormais entre si, o produto interno entre as tetradas deve satisfazer

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

onde $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico. A inversa da equação acima é dada por

$$g_{\mu\nu} = e^{\hat{a}}{}_{\mu}e^{\hat{b}}{}_{\nu}\eta_{\hat{a}\hat{b}}. \quad (3.8)$$

As bases locais duais $\{\theta^{\hat{a}}\}$ são definidas por $\langle \theta^{\hat{a}}, e_{\hat{b}} \rangle = \delta_{\hat{b}}^{\hat{a}}$. $\{\theta^{\hat{a}}\}$ está relacionada às bases 1-formas globais dx^{μ} (veja o apêndice A) através dos vierbeins

$$\theta^{\hat{a}} = e^{\hat{a}}{}_{\mu}dx^{\mu}. \quad (3.9)$$

Em termos de θ^a , a métrica é dada por

$$g = g_{\mu\nu}dx^{\mu}dx^{\nu} = \delta_{ab}\theta^{\hat{a}} \otimes \theta^{\hat{b}}. \quad (3.10)$$

As matrizes γ^{μ} satisfazem a álgebra de Clifford

$$\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = 2g^{\mu\nu}. \quad (3.11)$$

Vamos definir um campo de tetradas $e_{\hat{a}}$ para um observador que se move com aceleração própria $a(\tau)$ e rotação própria $\omega(\tau)$, onde τ é o tempo próprio. Escolhemos o vetor tipo-tempo $e_{\hat{0}} = u^{\mu}$ de modo que ele seja idêntico a 4-velocidade do observador; os outros $e_{\hat{i}}$, com $\hat{i} = 1, 2, 3$, são definidos de maneira que sejam ortogonais a $e_{\hat{0}}$ e rotacionem com rotação angular $\omega(\tau)$. A tetrada é transportada ao longo da linha de universo de acordo com a expressão

$$\frac{de_{\hat{a}}{}^{\mu}}{d\tau} = \Omega^{\mu\nu}e_{\hat{a}}, \quad (3.12)$$

onde $\Omega^{\mu\nu}$ é o tensor de aceleração antissimétrico, $\Omega^{\mu\nu} = -\Omega^{\nu\mu}$. que é dividido em uma parte Fermi-Walker transportada (sem rotação) $\Omega_F^{\mu\nu}$ e uma parte de rotação $\Omega_R^{\mu\nu}$:

$$\Omega^{\mu\nu} = \Omega_F^{\mu\nu} + \Omega_R^{\mu\nu}, \quad (3.13)$$

onde

$$\Omega_F^{\mu\nu} = (a^\mu u^\nu - a^\nu u^\mu)/c^2, \quad (3.14)$$

$$\Omega_R^{\mu\nu} = u_{\hat{a}} \omega_{\hat{b}} \epsilon^{\hat{a}\hat{b}\mu\nu}/c, \quad (3.15)$$

em que a^μ é a 4-aceleração e ω^μ é 4-rotação do observador e $\epsilon^{\hat{a}\hat{b}\mu\nu}$ é o tensor de Levi-Civita. É interessante observar que existe uma analogia entre o tensor de aceleração e o tensor de campo eletromagnético $F^{\mu\nu}$, em que $F_{i0} = E_i$ é a parte elétrica e $F_{ij} = \epsilon_{ijk} B_k$. No caso do tensor de aceleração, a parte “elétrica” corresponde à aceleração linear do observador, $\Omega_{\hat{0}\hat{i}} = a_{\hat{i}}$, enquanto que a parte “magnética” corresponde à velocidade angular, $\Omega_{\hat{i}\hat{j}} = \epsilon_{\hat{i}\hat{j}\hat{k}} \omega_{\hat{k}}$.

A relação das tetradas locais do observador com as tetradas de coordenadas $e_\mu = \partial_\mu$ é dada por

$$\begin{aligned} e_{\hat{0}} &= \frac{1}{1 + \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}}{c^2}} \left[e_0 - \frac{1}{c} (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^k e_k \right], \\ e_{\hat{i}} &= e_i. \end{aligned} \quad (3.16)$$

De posse da equação (3.16), podemos obter as bases de 1-forma duais, a saber

$$\begin{aligned} \theta^{\hat{0}} &= (1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{r}/c^2) dx^0, \\ \theta^{\hat{i}} &= dx^i + [(\boldsymbol{\omega}/c) \times \mathbf{r}] dx^0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Utilizando as bases duais, encontramos a métrica

$$\begin{aligned} ds^2 &= \theta^{\hat{0}} \times \theta^{\hat{0}} - \theta^{\hat{1}} \times \theta^{\hat{1}} - \theta^{\hat{2}} \times \theta^{\hat{2}} - \theta^{\hat{3}} \times \theta^{\hat{3}} = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \\ &= (dx^0)^2 [1 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}/c^2 + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}/c^2)^2 + (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{r}/c)^2 + (\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\omega}/c^2)((\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})] \\ &\quad - 2dx^0 d\mathbf{r} \cdot (\boldsymbol{\omega}/c) \times \mathbf{r} - d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

As componentes da conexão com a respeito a (3.16) são dadas por

$$\begin{aligned} \Gamma_{\hat{i}\hat{j}\hat{0}} &= \frac{\epsilon_{ijk} \omega^k/c}{1 + \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}}{c^2}}, \\ \Gamma_{\hat{0}\hat{i}\hat{0}} &= \Gamma_{\hat{i}\hat{0}\hat{0}} = -\frac{a^i/c^2}{1 + \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}}{c^2}}, \\ \Gamma_{\hat{\mu}\hat{\nu}\hat{i}} &= \Gamma_{\hat{0}\hat{0}\hat{0}} = 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Substituindo as equações (3.16), (3.17) e (3.18) na equação (3.2), temos

$$\begin{aligned} \nabla_{\hat{0}} &= \frac{1}{1 + \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}}{c^2}} \left[\frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{1}{2c} \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\alpha} - \frac{i}{c\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J} \right], \\ \nabla_{\hat{i}} &= \frac{\partial}{\partial x^i}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{r} \times (-i\hbar)\nabla + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \quad (3.20)$$

é o momento angular total da partícula e $\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0\boldsymbol{\gamma}$ são as matrizes de Dirac. Substituindo a equação (3.19) na equação (3.1), podemos reescrever a equação de Dirac covariante na forma

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad (3.21)$$

com o Hamiltoniano dado por

$$H = \beta mc^2 + \mathcal{O} + \mathcal{E}, \quad (3.22)$$

onde

$$\mathcal{O} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{2c} [(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha}) + (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r})] \quad (3.23)$$

representa o operador ímpar, e

$$\mathcal{E} = \beta m(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}) - \boldsymbol{\omega} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \quad (3.24)$$

o operador par.

No contexto da equação de Dirac, os termos do Hamiltoniano podem ser classificados como pares ou ímpares. Os termos pares comutam com a matriz β , enquanto os termos ímpares anticomutam com β . Em outras palavras, termos pares (\mathcal{E}) são aqueles que comutam com β , ou seja, $\{\beta, \mathcal{E}\} = 0$. Esses termos normalmente correspondem a energias ou massas que não misturam os componentes de partícula e antipartícula. Já os termos ímpares (\mathcal{O}) são aqueles que anticomutam com β , ou seja, $\{\beta, \mathcal{O}\} = \beta\mathcal{O} + \mathcal{O}\beta = 0$. Esses termos geralmente envolvem operadores que misturam componentes de partícula e antipartícula, como operadores de momento.

Para analisar o limite não relativístico, aplicamos a transformação de Foldy-Wouthuysen-Tani. Esta transformação é uma técnica que permite separar os componentes de alta e baixa energia do operador Hamiltoniano, tornando-o mais adequado para a interpretação física em termos de partículas e antipartículas distintas. O procedimento consiste em realizar uma série de transformações unitárias que simplificam o Hamiltoniano, geralmente três, de modo a eliminar os termos que misturam esses componentes [105–107].

Após aplicar três transformações de Foldy-Wouthuysen-Tani o Hamiltoniano no limite não

relativístico, ignorando termos de ordem $O(1/m^3)$, é dado por

$$H = \beta mc^2 + \beta \frac{p^2}{2m} + \beta (\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}) + \beta \frac{\mathbf{p}}{2m} \cdot \left(\frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}}{c^2} \right) \cdot \mathbf{p} - \boldsymbol{\omega} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) + \frac{\hbar}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{p}). \quad (3.25)$$

Aqui, cada termo tem um significado físico claro. O termo $-\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{L}$ está relacionado ao efeito Sagnac. O termo $-\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{S}$ descreve o acoplamento do spin com a rotação. O termo $\frac{\hbar}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{p})$ representa o acoplamento spin-órbita.

3.2 Equação de Pauli-Schrödinger em um referencial girante

Nesta seção, consideramos o caso particular de uma partícula de spin-1/2 em um referencial girante na presença de um campo eletromagnético sem aceleração translacional. Partimos da equação de Dirac covariante (3.1) e incluímos os efeitos do campo eletromagnético através do acoplamento não mínimo do campo de calibre $A_\mu = (A_0, \mathbf{A})$. Ficamos então com

$$(i\gamma^\mu \nabla_\mu - m) \psi = 0, \quad (3.26)$$

onde

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu - iqA_\mu. \quad (3.27)$$

Vamos definir a tetrada para um observador em um referencial rotacionando da mesma forma que fizemos na seção anterior, com a diferença de que agora $\mathbf{a} = 0$. Escolhemos a tetrada, como na seção anterior, como estando sempre tangente à linha de mundo da partícula $e_{\hat{0}} = u^\mu$, onde u^μ é a sua quadrivelocidade e a tríade espacial $e_{\hat{i}}$ é definida de forma que os vetores sejam ortogonais a $e_{\hat{0}}$ e rotacionem com velocidade angular $\omega(\tau)$. A relação que estabelece a conexão entre as tetradas locais a as coordenadas gerais é dada por

$$e_{\hat{0}} = \left[e_0 - \frac{1}{c} (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^k e_k \right], \quad e_{\hat{i}} = e_i. \quad (3.28)$$

Da equação acima, obtemos as bases de 1-formas duais

$$\theta^{\hat{0}} = dx^0, \quad \theta^{\hat{i}} = dx^i + \frac{1}{c} (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) dx^0. \quad (3.29)$$

A métrica é então obtida da relação

$$ds^2 = \theta^{\hat{0}} \times \theta^{\hat{0}} - \theta^{\hat{1}} \times \theta^{\hat{1}} - \theta^{\hat{2}} \times \theta^{\hat{2}} - \theta^{\hat{3}} \times \theta^{\hat{3}} = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (3.30)$$

que pode ser escrita mais explicitamente como

$$ds^2 = (dx^0)^2 \left[1 + \left(\mathbf{r} \cdot \frac{\boldsymbol{\omega}}{c} \right)^2 \right] - 2dx^0 d\mathbf{r} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\omega}}{c} \right) \times \mathbf{r} - d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}. \quad (3.31)$$

A conexão de spin com respeito a (3.28) é dada por

$$\Gamma_0 = \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{S}}{2c}, \quad \Gamma_i = 0. \quad (3.32)$$

Usando as equações (3.28), (3.29) e (3.32), a equação de Dirac no referencial girante pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (3.33)$$

com o Hamiltoniano dado por

$$H = \beta mc^2 + \mathcal{O} + \mathcal{E}, \quad (3.34)$$

com

$$\mathcal{O} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \quad (3.35)$$

$$\mathcal{E} = \beta m(\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}) - \boldsymbol{\omega} \cdot (\boldsymbol{\omega} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi}) + \mathbf{S}), \quad (3.36)$$

onde $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ é o momento canônico de uma partícula carregada em um campo eletromagnético. O termo $\boldsymbol{\omega} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi})$ produz as forças inerciais centrífuga, de Coriolis e de Euler, e o termo $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{S}$ é o acoplamento do spin com a rotação.

Para acessar o limite não relativístico da equação de Dirac, novamente, usamos a transformação de Foldy-Wouthuysen. Depois de aplicações sucessivas dessas transformações e depois ignorando os termos de ordem maiores a $1/m$, obtemos o seguinte Hamiltoniano para as componentes superiores dos espinores de Dirac em um referencial girante:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H'\psi, \quad (3.37)$$

$$H' = H_K + H_Z + H_I, \quad (3.38)$$

onde

$$H_K = \frac{1}{2m}\pi^2 + qA_0, \quad (3.39a)$$

$$H_Z = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.39b)$$

$$H_I = \boldsymbol{\omega} \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi} + \mathbf{S}), \quad (3.39c)$$

com

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m}. \quad (3.40)$$

Nas três equações anteriores, o termo H_K contém o termo cinético e o potencial escalar; H_Z contém o termo associado ao efeito Zeeman, enquanto H_I é o termo que contém a interação do momento angular total com a rotação.

De acordo com o capítulo 17 da Ref. [108], uma maneira mais simples de obter a equação (3.38) é incluir os efeitos eletromagnéticos e da rotação na equação de Schrödinger através dos campos de calibre $A_{ele}^\mu = (A^0, \mathbf{A})$ e $A_{rot}^\mu = (-(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2/2, \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ por meio do acoplamento

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - A_{ele}^\mu - A_{rot}^\mu, \quad (3.41)$$

e, subsequentemente, ignorar os termos de correção relativística. Observe que a equação (3.38) é o Hamiltoniano de Pauli que descreve o movimento de elétrons em um campo eletromagnético acrescido dos termos relacionados aos efeitos não inerciais. No limite em que a velocidade angular é nula, obtemos o Hamiltoniano de Pauli usual [109].

Estados ligados para o problema de Aharonov-Bohm para partícula de Spin-1/2 em um referencial girante

Neste capítulo, aplicando o que foi desenvolvido nos capítulos anteriores, estudamos o movimento quântico não relativístico de uma partícula carregada de massa m_e em um referencial girante na presença do efeito AB, levando em conta os efeitos de spin.

Os resultados desse estudo levaram à publicação do nosso primeiro artigo, na revista *Universe* [110].

4.1 A equação de movimento

A equação que descreve o movimento não relativístico de partículas de spin-1/2 em campos eletromagnéticos é a equação de Pauli-Schrödinger. Uma maneira de obter esta equação é partir da equação relativística de Dirac e em seguida aplicar sucessivas transformações de Foldy-Wouthuysen-Tani [109], como fizemos no capítulo anterior para uma partícula em um referencial não inercial. A expansão do Hamiltoniano para a ordem de $1/m_e$ contém a energia independente do spin (energia cinética e energia potencial) e a energia de interação (energia do dipolo magnético, acoplamento spin-rotação e a energia devido aos efeitos inerciais). A expansão da ordem $1/m_e^2$ contém termos com correções relativísticas, como o acoplamento spin-órbita.

Para nossos propósitos, é suficiente considerar o Hamiltoniano somente até a ordem $1/m_e$. Podemos justificar isso observando que a primeira ordem já fornece os termos que envolvem o grau de liberdade do spin e a rotação. Em um dos artigos que motiva esta tese [110], seguimos o modelo alternativo apresentado no Capítulo 17 da Ref. [108], que leva em conta apenas o spin e a rotação sem a inclusão de termos de correção relativística e inclui os efeitos da rotação por meio de um acoplamento mínimo

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - m_e \mathcal{A}^\mu, \quad \mathcal{A}^\mu = \left(-\frac{1}{2} (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2, \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \right), \quad (4.1)$$

com \mathcal{A}^μ sendo o campo de calibre para o referencial em rotação, $\boldsymbol{\omega}$ a velocidade angular e $\mu = 0, 1, 2, 3$. Para incluir o efeito AB, devemos considerar a partícula interagindo com o campo de calibre eletromagnético, $A^\mu = (A^0, \mathbf{A})$, que pode ser introduzido na equação de Schrödinger usando a substituição mínima, conforme definido acima. Definimos o tubo de fluxo magnético para o problema de AB como

$$e\mathbf{A} = \left(0, -\frac{\phi}{\rho}, 0 \right), \quad e\mathbf{B} = \left(0, 0, -\phi \frac{\delta(\rho)}{\rho} \right), \quad (4.2)$$

com $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, $A^0 = 0$. A quantidade $\phi = e\Phi/2\pi\hbar = -\Phi/\Phi_0$ está relacionada ao fluxo de AB, no qual Φ denota o fluxo magnético e $\Phi_0 = h/e$ indica o quantum do fluxo magnético. Em seguida, para implementar as substituições acima na equação de Schrödinger, usamos a substituição $p^\mu \rightarrow p^\mu - m_e \mathcal{A}^\mu - eA^\mu$. Como o problema de AB tem invariância translacional na direção z , podemos excluir o grau de liberdade z impondo $p_z = z = 0$ [27, 30, 111, 112].

Depois de adicionar o termo de rotação de spin ao Hamiltoniano de Schrödinger, chegamos à equação de movimento de Pauli-Schrödinger

$$H\psi = \mathcal{E}\psi, \quad (4.3)$$

onde

$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - m_e \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2} m_e (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 - \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} \quad (4.4)$$

é o Hamiltoniano do sistema e $\sigma^i = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ são as matrizes Pauli padrão. A interpretação dos termos no Hamiltoniano (4.4) é dada da seguinte forma. O primeiro termo corresponde ao cinético, enquanto o segundo termo corresponde ao potencial escalar relacionado à rotação. O terceiro termo descreve a interação Zeeman, enquanto o último é o acoplamento spin-rotação. Neste ponto, vale a pena fazer um breve comentário sobre o termo de Zeeman sendo $\boldsymbol{\mu} = -\mu\boldsymbol{\sigma}$ o

momento magnético dos elétrons e $\mu = e\hbar/2m_e = 2e/mc/S$, onde $S = \hbar\sigma/2$ é operador de spin. O fator giromagnético é normalmente considerado como sendo $g = 2$. No entanto, se considerarmos o magnético anômalo dos elétrons, teremos $g = 2(1 + a)$, com $a = 0,001\,159\,652\,182\,79$ [113]. Ele corresponde ao desvio com relação ao caso usual (valor do desvio no ano de 2008.). Dessa forma, podemos fazer a substituição $\mu \rightarrow \mu(1 + a)$. Em nossa análise numérica abaixo, usamos o valor de g acima. Esse valor é crucial para o aparecimento das curvas das energias dos estados ligados. Como esse desvio é pequeno, ele também justifica a consideração somente até a ordem $1/m_e$.

Voltando ao problema, vamos assumir que a velocidade angular $\boldsymbol{\omega}$ está ao longo do eixo z , ou seja, $\boldsymbol{\omega} = \Omega \hat{\mathbf{z}}$. Em coordenadas cilíndricas, a coordenada radial é identificada como $\mathbf{r} = \rho \hat{\boldsymbol{\rho}}$, de modo que $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} = \Omega \rho \hat{\boldsymbol{\phi}}$. Considerando essas definições, o Hamiltoniano da Equação (4.4) assume a forma de

$$H = \frac{1}{2m_e} (p^2 + e^2 A_\varphi^2 - 2eA_\varphi p_\varphi - 2m_e \Omega \rho p_\varphi + 2em_e A_\varphi \Omega \rho) - \left(\frac{g}{2}\right) \frac{e\hbar}{2m_e} \sigma^z B^z - \frac{\hbar}{2} \sigma^z \Omega. \quad (4.5)$$

Agora, usando as configurações de campo e potencial da Equação (4.2) no Hamiltoniano (4.5), encontramos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\phi \right)^2 + 2m_e \Omega \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(-\frac{g\phi}{2} \sigma^z \frac{\delta(\rho)}{\rho} + \frac{m_e \Omega}{\hbar} \sigma^z + \frac{2m_e \Omega \phi}{\hbar} \right). \quad (4.6)$$

Além dos termos envolvendo o campo magnético e a rotação, separadamente, podemos observar que o último termo na expressão (4.6) acima corresponde a um efeito combinado entre a rotação e o campo magnético. Conforme apontado na Ref. [27], a função δ não pode ser negligenciada no tratamento do modelo se queremos resolver o problema levando em conta o spin da partícula. De fato, a ausência do termo de interação Zeeman na Equação (4.4) leva ao efeito AB para partícula sem spin, em que a solução do problema para estados ligados não é mais possível, a menos que outras imposições sejam realizadas. Um exemplo disso, seria considerar o solenoide dentro de um cilindro de raio fixo, exigindo que as funções de onda se anulem na superfície lateral do cilindro. Contudo, isso levaria a um mais simplificado. A questão mais importante que deve ser enfatizada nesse momento é que estados ligados aparecem naturalmente no problema quando o spin da partícula é levado em conta. Deste modo, a partir da Equação (4.3), podemos observar que ψ é uma autofunção de σ^z , cujos autovalores são $s = \pm 1$, satisfazendo $\sigma^z \psi = \pm \psi = s\psi$.

Assim, assumindo autofunções de (4.6) da forma

$$\psi(\rho, \varphi) = f(\rho)e^{im\varphi}, \quad (4.7)$$

em que $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ é o número quântico do momento angular, obtemos a equação radial

$$\mathcal{H}f(\rho) = \mathcal{K}^2 f(\rho), \quad (4.8)$$

onde

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}gs\phi \frac{\delta(\rho)}{\rho} \quad (4.9)$$

e

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{(m + \phi)^2}{\rho^2}, \quad (4.10)$$

$$\mathcal{K}^2 = \frac{2m_e \mathcal{E}}{\hbar^2} + \frac{2m_e \Omega}{\hbar} \left(m + \phi + \frac{s}{2} \right). \quad (4.11)$$

Como podemos ver na Equação (4.9), a inclusão do spin da partícula na abordagem implica em um termo adicional no Hamiltoniano. Esse termo representa uma singularidade na origem. Com a presença dele, o operador perde a propriedade de auto-adjunticidade. A partir da teoria das extensões auto-adjuntas, sabemos que a auto-adjunticidade de um operador em mecânica quântica é uma propriedade crucial, pois somente operadores autoadjuntos têm uma decomposição espectral. Devemos resolver a Equação (4.8) usando uma técnica baseada no método de extensão auto-adjunta de operadores na mecânica quântica. Faremos isso na próxima seção. Há vários exemplos de trabalhos na literatura, incluindo o que usamos aqui, que utilizam as extensões auto-adjuntas em vários contextos físicos, abordando o problema para estados ligados e de espalhamento [114–128].

4.2 Extensões auto-adjuntas de operadores e o Método de Kay-Studer

A base matemática sobre a qual a mecânica quântica está alicerçada é a da teoria de espaços de Hilbert. Assim, os observáveis são operadores lineares autoadjuntos que atuam no espaço de estados do sistema em consideração. Esse formalismo é essencial para conectar as ideias puramente teóricas e as medidas realizadas em laboratório, já que é capaz de descrever a natureza probabilística da teoria quântica.

Na maioria dos livros-texto de mecânica quântica, os termos “hermitiano” e “auto-adjunto” são frequentemente usados como sinônimos ao se referir aos operadores correspondentes a observáveis físicos. No entanto, existe uma sutil, mas importante, diferença entre esses dois conceitos que é muitas vezes deixada de lado nos cursos básicos.

Essa distinção é importante porque as propriedades necessárias para que um operador represente um observável físico – como ter autovalores reais, a unitariedade da evolução temporal dos estados – são garantidas apenas para operadores auto-adjuntos, além de alguns paradoxos na resolução de problemas quando não avaliamos se, de fato, um operador é autoadjunto em um determinado domínio. Portanto, embora os termos “hermitiano” e “auto-adjunto” sejam usados de forma intercambiável em contextos introdutórios, compreender essa diferença é crucial [129, 130].

Para um matemático, um operador atuando em um espaço de Hilbert é definido por sua ação e por seu domínio. A ação é definida pelo que o operador faz em um estado, enquanto que seu domínio é o conjunto de funções nas quais ele pode atuar. A literatura de mecânica quântica ignora (com algumas poucas exceções [131]) a definição do domínio na construção de operadores autoadjuntos. Porém, como veremos em breve, é aí que está a diferença entre operadores hermitianos (ou simétricos, na literatura matemática) e autoadjuntos. Esta distinção, que pode parecer apenas preciosismo, pode ser fonte de algumas inconsistências na solução de problemas de mecânica quântica. É motivado por um desses problemas, a aparição de termos singulares em Hamiltonianos. Para lidar com Hamiltonianos singulares, utilizamos o método da extensão auto-adjunta de operadores.

Nesta seção, vamos revisar alguns conceitos e resultados importantes da teoria de von-Neumann-Krein de extensões auto-adjuntas de operadores. Primeiro, vamos introduzir algumas definições básicas, que serão usadas em seguida para estabelecer critérios para a definição de um operador autoadjunto e para a existência de extensões auto-adjuntas de operadores lineares. Por fim, vamos discutir o método de Kay-Studer, que será utilizado para encontrar a família de extensões auto-adjuntas adequadas do Hamiltoniano que iremos estudar.

4.2.1 O método de extensão auto-adjunta

Sejam A e B dois operadores. Se o domínio de A contém o domínio de B , ou seja, $D(A) \subseteq D(B)$, e no domínio de B os operadores são iguais, então dizemos que A é uma extensão de B .

O domínio de um operador A é chamado de denso se, para cada vetor ψ neste domínio, existir uma sequência ψ_n tal que $\psi_n \rightarrow \psi$. Se um operador A possui um domínio denso, o domínio do seu adjunto A^\dagger é o conjunto de todos os vetores ϕ para os quais existe um vetor $A^\dagger\psi$ que satisfaz

$$(\phi, A^\dagger\psi) = (A\phi, \psi) \quad \text{para todos os vetores } \phi \in D(A). \quad (4.12)$$

A equação (4.12) define A^\dagger . Por outro lado, um operador com domínio denso A é simétrico se

$$(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi) \quad \text{para cada } \phi \text{ e } \psi \text{ em seu domínio.} \quad (4.13)$$

Neste caso, A^\dagger é definido como $A^\dagger = A$ para todo $\psi \in D(A)$, e A^\dagger é dito ser uma extensão de A . Se $A^\dagger = A$, então A é chamado autoadjunto. É interessante comentar que na física é comum assumir que Hermitiano é o mesmo que autoadjunto. No entanto, são conceitos diferentes na literatura matemática e apenas a palavra Hermitiano pode ser usada para simétrico.

Um ponto importante aqui é que um operador simétrico pode não ser um operador autoadjunto. Para que A seja um operador autoadjunto, ele precisa ser simétrico, $A = A^\dagger$, e os domínios do operador e do seu adjunto também precisam ser iguais, $D(A) = D(A^\dagger)$. Assim, da mesma forma que uma função precisa de uma regra, um domínio e um contradomínio para ser definida, um operador precisa não apenas de sua ação, mas também de seu domínio (espaço de Hilbert) para ser completamente definido.

Teorema de Weyl-Von Neumann

Seguindo o conceito de extensão autoadjunta, a questão que queremos responder é quantas extensões, se houver, são admitidas por um operador. A resposta para essa pergunta reside no conceito de índice de deficiência de um operador. Seja A um operador simétrico com domínio $D(A)$ e o operador adjunto correspondente A^\dagger com domínio $D(A^\dagger)$. Os subespaços de deficiência N_\pm são definidos por

$$N_\pm = \{\psi \in D(A^\dagger) : A^\dagger\psi = z_\pm\psi, \text{Im}(z_\pm) \gtrless 0\}, \quad (4.14)$$

com dimensão $\dim N_\pm = n_\pm$. O par de inteiros não negativos (n_+, n_-) é chamado de índices de deficiência de A . O valor exato de z_\pm não é importante desde que z_+ (z_-) pertença ao semiplano superior (inferior) do plano complexo. Por simplicidade, escolhemos $z_\pm = \pm iz_0$, com z_0 um número real positivo arbitrário, usado por razões dimensionais. Dessa forma, para acessar os índices de deficiência, tudo o que precisamos fazer é resolver a equação de autovalor

$$A^\dagger\psi = \pm iz_0\psi,$$

e então contar o número de soluções linearmente independentes que pertencem ao domínio do operador adjunto no espaço de Hilbert em questão, ou seja, aquelas que são integráveis ao quadrado.

Teorema 4.2.1. *Considere um operador A com índices de deficiência (n_+, n_-) :*

1. *Se $n_+ = n_-$, A é essencialmente autoadjunto;*
2. *Se $n_+ = n_- = n \geq 1$, A possui um número infinito de extensões autoadjuntas parametrizadas por uma matriz unitária $U : N_+ \rightarrow N_-$ de dimensão n com n^2 parâmetros reais;*
3. *Se $n_+ \neq n_-$, A não admite uma extensão autoadjunta.*

Portanto, o domínio de A^\dagger é dado por

$$D(A^\dagger) = D(A) \oplus N_+ \oplus N_-.$$

Portanto, é importante observar que mesmo para operadores hermitianos, $A = A^\dagger$, seus domínios podem ser diferentes. Dessa forma, a extensão autoadjunta consiste essencialmente em estender o domínio de A usando os subespaços de deficiência N_\pm para combinar com o domínio de A^\dagger .

Depois da discussão de alguns conceitos gerais sobre a abordagem de extensão autoadjunta, restringimos nossa discussão ao caso específico de operadores Hamiltonianos singulares H em dimensões $(2 + 1)$. Nesses casos, a singularidade é caracterizada pela presença de uma função delta bidimensional localizada em $r = 0$. É bem conhecido na literatura que esses Hamiltonianos não são autoadjuntos e admitem uma família de extensões autoadjuntas de um parâmetro. Assim, nosso principal objetivo é resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$H\psi = E\psi,$$

com H sendo o Hamiltoniano, ψ a função de onda e E a energia.

Para isso, discutiremos o método proposto por Kay e Studer [132] para caracterizar a família de extensões autoadjuntas de H . Neste método, a singularidade da função delta é substituída por uma condição de contorno na origem. Tal condição de contorno é uma correspondência das derivadas logarítmicas das soluções de energia zero para o Hamiltoniano regularizado e as soluções para o Hamiltoniano H sem a função delta mais uma extensão autoadjunta.

4.3 O Método de Kay e Studer

Em um artigo publicado em 1991, Kay e Studer investigaram, no contexto de extensões autoadjuntas, as condições de contorno para Hamiltonianos singulares em espaços cônicos e campos ao redor de cordas cósmicas. Dentre os problemas estudados, estão os análogos ao problema AB em duas dimensões.

O método KS começa considerando um procedimento de regularização para a interação pontual (idealização onde a interação entre partículas ou objetos é considerada como ocorrendo em um ponto específico, sem extensão espacial) na origem. Assim, para o Hamiltoniano regularizado, onde a interação pontual é deslocada da origem por um raio r_0 muito pequeno e finito, o método é aplicado da seguinte maneira [133]:

1. Temporariamente, omitimos a interação pontual na origem substituindo o Hamiltoniano singular pelo correspondente não singular;
2. Resolvemos a Equação para os espaços de deficiência do Hamiltoniano não singular;
3. As soluções obtidas no passo anterior são utilizadas para completar o espaço de soluções para o Hamiltoniano não singular;
4. Por fim, utilizamos uma condição de contorno que iguala as derivadas logarítmicas das soluções de energia zero para o Hamiltoniano regularizado do passo 1 e as soluções gerais obtidas no passo 3 é empregada:

$$\lim_{r_0 \rightarrow 0^+} \frac{r_0 g'_0}{g_0} = \lim_{r_0 \rightarrow 0^+} \frac{r_0 g'_\lambda}{g_\lambda} \quad \text{em } r = r_0,$$

onde g_λ são as soluções obtidas no passo 3 e g_0 são as soluções de energia zero ($g' = \frac{dg}{dr}$).

Agora que discutimos a abordagem de extensão autoadjunta e o método KS, a seguir exemplificamos a aplicação do método ao problema de estados do efeito Aharonov-Bohm para uma partícula com spin $\frac{1}{2}$ em um referencial girando.

4.4 Solução utilizando extensões auto-adjuntas

Nesta seção, resolvemos a Equação (4.8) usando a abordagem baseada no método de extensão auto-adjunta. Utilizaremos o método de Kay-Studer para encontrar as soluções. O

método exige que, temporariamente, devemos negligenciar o potencial da função δ na Equação (4.9) e substituir o problema na Equação (4.8) pela equação de autovalor para \mathcal{H}_0

$$\mathcal{H}_0 f_\xi = \mathcal{K}^2 f_\xi, \quad (4.15)$$

juntamente com suas extensões auto-adjuntas. Na Equação (4.15), a função de onda é rotulada pelo parâmetro ξ , denominado de parâmetro das extensões auto-adjuntas. Esse parâmetro está relacionado ao comportamento de f_ξ na origem. A próxima etapa da abordagem é exigir que o operador \mathcal{H}_0 seja convertido em um operador autoadjunto. Isso é feito estendendo seu domínio de definição pelo subespaço deficiente, que é englobado pelas soluções da equação de autovalor.

$$\mathcal{H}_0^\dagger f_\pm = \pm i \mathcal{K}_0^2 f_\pm, \quad (4.16)$$

onde $\mathcal{K}_0^2 \in \mathbb{R}$ é introduzido por razões dimensionais. Com o domínio de \mathcal{H}_0 estendido, isso nos garante que ele agora é um operador auto-adjunto e as únicas funções quadrado integráveis são as funções f_\pm . Para encontrar essas funções, devemos usar o operador (4.10) em (4.16) e resolver a equação

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{(m + \phi)^2}{\rho^2} \right\} f_\pm = \pm \mathcal{K}_0^2 f_\pm. \quad (4.17)$$

Em seguida, fazemos a mudança de variável

$$x = \sqrt{\mp i} \mathcal{K}_0 \rho \quad \rightarrow \quad x^2 = \mp i \mathcal{K}_0^2 \rho^2, \quad (4.18)$$

e obtemos novas expressões para as derivadas

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{d}{dx} \frac{dx}{d\rho} = \sqrt{\mp i} \mathcal{K}_0 \frac{d}{dx} \quad (4.19)$$

e

$$\frac{d^2}{d\rho^2} = \frac{d}{dr} \left(\frac{d}{d\rho} \right) = \mp i \mathcal{K}_0^2 \frac{d^2}{dx^2}. \quad (4.20)$$

Substituindo em 4.17, temos

$$\left[\mp i \mathcal{K}_0^2 \frac{d^2}{dx^2} \mp i \frac{\mathcal{K}_0^2}{x} \frac{d}{dx} \pm \frac{(m + \phi)^2}{x^2} \right] f_\pm = \mp i \mathcal{K}_0^2 f_\pm. \quad (4.21)$$

Depois de multiplicar a equação acima por $\mp(x^2/i\mathcal{K}_0)$, ficamos com

$$\left[x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + x^2 - (m + \phi)^2 \right] f_\pm = 0 \quad (4.22)$$

cujas soluções são dadas em termos das funções de Bessel modificadas do segundo tipo

$$f_{\pm} = K_{|m+\phi|}(\sqrt{\mp i}\mathcal{K}_0 \rho), \quad (4.23)$$

com $\text{Im} \sqrt{\pm i} > 0$. É possível verificar que as funções (4.23) são quadrado integráveis somente no intervalo $(m + \phi) \in (-1, 1)$, para o qual \mathcal{H}_0 não é autoadjunto. Isso pode ser verificado usando o comportamento assintótico da Equação (4.23) para $\rho \rightarrow 0$, calculando $\int_0^\infty \int_0^\pi |\psi(\rho, \varphi)|^2 d\rho d\varphi$ e, subsequentemente, verificar sob quais condições esse resultado deve ser finito. Nesse caso, a dimensão do subespaço de deficiência é $(n_+, n_-) = (1, 1)$ [31, 111, 112, 128]. Dessa forma, o conjunto $\mathcal{D}(\mathcal{H}_{\xi,0})$ em $L^2(\mathbb{R}^+, \rho d\rho)$ é dado pelo conjunto de funções [130]

$$f_\xi(\rho) = f_m(\rho) + C \left[K_{|m+\phi|}(\sqrt{-i}\mathcal{K}_0 \rho) + e^{i\xi} K_{|m+\phi|}(\sqrt{i}\mathcal{K}_0 \rho) \right], \quad (4.24)$$

onde $f_m(\rho)$, com $f(0) = \dot{f}(0) = 0$, é a função de onda regular e o parâmetro de extensão autoadjunta $\xi \in [0, 2\pi)$ representa uma escolha para a condição de contorno. A expressão (4.24) é uma consequência da teoria de von Neuman [130]. Além disso, sabemos que, para valores diferentes de ξ , temos domínios diferentes para \mathcal{H}_0 . A condição de contorno adequada será determinada pelo sistema físico [114, 121, 122, 134]. Essa propriedade importante nos permite usar o seguinte procedimento de regularização física para o vetor potencial do campo magnético [27, 28, 135, 136]:

$$e\mathbf{A} = \begin{cases} -\frac{\phi}{\rho}\hat{\varphi}, & \rho > R, \\ 0, & \rho < R, \end{cases} \quad (4.25)$$

em que substituímos o solenoide de raio nulo temporariamente por um de raio finito R [121, 132], que é um raio muito pequeno, menor que o comprimento de onda de Compton λ_C dos elétrons [118]. Podemos fazer a seguinte substituição para a função δ na Equação (4.9):

$$\frac{\delta(\rho)}{\rho} \rightarrow \frac{\delta(\rho - R)}{R}. \quad (4.26)$$

Essa forma regularizada da função δ nos permite determinar uma expressão para o parâmetro de extensão auto-adjunta ξ . Para fazer isto, primeiro consideramos as soluções de energia zero f_0 para \mathcal{H}_0 e $f_{\xi,0}$ para \mathcal{H} com a regularização (4.26). Assim, utilizando a equação (4.26), reescrevemos (4.9) e (4.10) como

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{(m + \phi)^2}{\rho^2} + \frac{1}{2} g s \phi \frac{\delta(\rho - R)}{R} \right] f_0 = 0, \quad (4.27)$$

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{(m+\phi)^2}{\rho^2} \right] f_{\xi,0} = 0. \quad (4.28)$$

O valor do parâmetro de extensão autoadjunto ξ é determinado pela seguinte condição de contorno para $f(\rho)$ na origem:

$$\lim_{R \rightarrow 0^+} R \frac{\dot{f}_0}{f_0} \Big|_{\rho=R} = \lim_{R \rightarrow 0^+} R \frac{\dot{f}_{\xi,0}}{f_{\xi,0}} \Big|_{\rho=R}. \quad (4.29)$$

O lado esquerdo da Equação (4.29) pode ser obtido pela integração direta de (4.27) de 0 a R . Após realizar esse cálculo, obtemos o resultado

$$\lim_{R \rightarrow 0^+} R \frac{\dot{f}_0}{f_0} \Big|_{\rho=R} = \frac{1}{2} g s \phi. \quad (4.30)$$

Para calcular o lado direito da Equação (4.29), buscamos as soluções de estados ligados de \mathcal{H}_0 , que nos permitem obter soluções de estados ligados para \mathcal{H} . No entanto, para encontrar uma expressão para essas energias de estados ligados, consideramos \mathcal{K} como uma quantidade imaginária pura, $\mathcal{K} \rightarrow i\mathcal{K}_b$. Dessa forma, temos a equação de Bessel modificada

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \left(\frac{(m+\phi)^2}{\rho^2} + \mathcal{K}_b^2 \right) \right] f_\xi(\rho) = 0, \quad (4.31)$$

cujas soluções encontradas são

$$f_\xi(\rho) = K_{|m+\phi|}(\mathcal{K}_b \rho). \quad (4.32)$$

Nesse estágio, podemos observar que a solução (4.32) pertence a $\mathcal{D}(\mathcal{H}_{\xi,0})$. Assim, podemos assumir uma solução com a forma (4.24) para alguns ξ selecionado da física do problema. Para calcular o lado direito da Equação (4.29), precisamos considerar a representação assintótica de (4.32) no limite $\rho \rightarrow 0$, dada pela função de Bessel

$$K_{|m+\phi|}(\mathcal{K}_b \rho) \sim \frac{\pi}{2 \sin(\pi |m+\phi|)} \left[\frac{(\mathcal{K}_b \rho)^{-|m+\phi|}}{2^{-|m+\phi|} \Gamma(1 - |m+\phi|)} - \frac{(\mathcal{K}_b \rho)^{|m+\phi|}}{2^{|m+\phi|} \Gamma(1 + |m+\phi|)} \right]. \quad (4.33)$$

Usando esse resultado da Equação (4.33) e a Equação (4.30) e substituindo-os na Equação (4.29), chegamos à seguinte expressão:

$$\lim_{R \rightarrow 0^+} R \frac{\dot{f}_{\xi,0}}{f_{\xi,0}} \Big|_{r=R} = \frac{\mathcal{A}_+}{\mathcal{A}_-} |m+\phi| = \frac{1}{2} g s \phi, \quad (4.34)$$

com

$$\mathcal{A}_\pm = R^{2|m+\phi|} \Gamma(1 - |m+\phi|) \left(\frac{\mathcal{K}_b}{2} \right)^{|m+\phi|} \pm 2^{|m+\phi|} \Gamma(1 + |m+\phi|). \quad (4.35)$$

Por fim, substituindo \mathcal{K} dado na Equação (4.11) na Equação (4.34) e resolvendo para \mathcal{E} , encontramos a seguinte expressão:

$$\mathcal{E} = -\frac{2\hbar^2\Lambda^{\frac{1}{|m+\phi|}}}{m_e R^2} - \hbar\Omega \left(m + \phi + \frac{s}{2} \right), \quad (4.36)$$

com

$$\Lambda = \frac{\Gamma(1 + |m + \phi|) \left(\frac{1}{2}gs\phi + |m + \phi| \right)}{\Gamma(1 - |m + \phi|) \left(\frac{1}{2}gs\phi - |m + \phi| \right)} \geq 0. \quad (4.37)$$

Para $\Omega = 0$, apenas o primeiro termo na Equação (4.36) permanece e a dependência explícita do elemento de spin está no parâmetro Λ .

É importante enfatizar que a energia (4.36) depende apenas dos parâmetros envolvidos no modelo. Em outras palavras, não aparecem parâmetros arbitrários provenientes da extensão auto-adjunta. Isso significa que o parâmetro de extensão auto-adjunta foi automaticamente autosselecionado por meio do procedimento de regularização física para a função δ na Equação (4.26). Entretanto, de acordo com as Refs. [31, 112], é possível obter uma forma explícita para a expressão que caracteriza o parâmetro de extensão autoadjunto em termos dos parâmetros físicos do problema. Em nosso caso, essa expressão é a seguinte

$$\xi = -\frac{1}{R^{2|m+\phi|}} \left(\frac{\frac{1}{2}gs\phi + |m + \phi|}{\frac{1}{2}gs\phi - |m + \phi|} \right). \quad (4.38)$$

Essa relação nos mostra que o parâmetro ξ pode assumir valores diferentes devido à sua dependência explícita de m , ϕ , s , g e do raio do solenoide, R . Embora a (4.36) seja uma expressão simples, se a analisarmos mais detalhadamente, perceberemos que a presença de rotação implica vários incomuns. Descobrimos que o principal impacto devido à rotação é o aparecimento de energias positivas. Quando não há rotação, o espectro (4.36) é puramente negativo. Na próxima seção, discutiremos em detalhes alguns perfis que podemos acessar a partir de energy (4.36).

4.5 Análise numérica e discussão dos resultados

Nesta seção, investigamos as mudanças na energia da partícula quando os parâmetros físicos do modelo são variados, em particular, a rotação e o fluxo de AB. Mostraremos que a energia (4.36) pode apresentar perfis diferentes, dependendo dos valores dos parâmetros e do número quântico m . Fizemos algumas análises numéricas para estudar o comportamento de \mathcal{E} como

uma função de ϕ e Ω e autovalores de spin $s = -1$. Escolhemos este valor de s , pois analisando (4.9), observa que apenas neste caso há soluções de estado ligado. Para $\Omega = 0$, a energia (4.36) é sempre negativa, independentemente dos valores dos parâmetros envolvidos. Para $\Omega > 0$, há um valor limite que depende dos valores que escolhemos para os parâmetros, e a energia pode ser positiva ou negativa. Esse efeito se deve à presença de rotação. Na Fig. 4.1, plotamos a energia como uma função do fluxo correspondente ao estado com $m = 0$. Na Fig. 4.1(a)-(c), consideramos três intervalos diferentes para Ω e $R = 5$ nm. Podemos ver que a energia é zero quando $\phi = 0, 5$. No intervalo com Ω entre 0,85 GHz e 1,0 GHz¹. Observamos que a energia

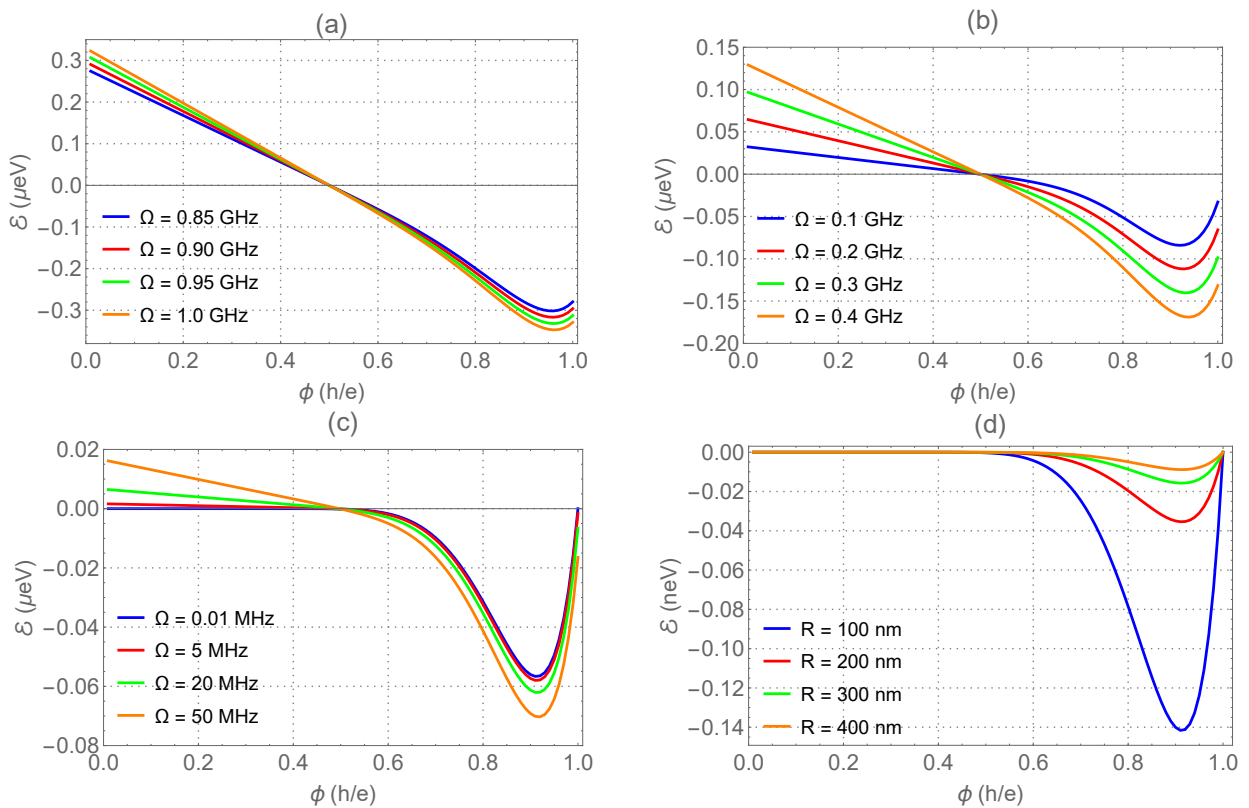


Figura 4.1: Energia como função do fluxo. Nas Figs. (a)-(c), consideramos três faixas de frequência diferentes para $m = 0$ e $R = 5$ nm. Na Fig. (d), consideramos alguns valores de R para $m = 0$ e $\Omega = 0$.

muda mais lentamente (Fig. 4.1(a)). Nesse intervalo, também podemos ver que, para o fluxo zero, as energias são positivas, com magnitudes da ordem de $0,3 \mu\text{eV}$. Quando investigamos o perfil no intervalo entre 0,1 GHz e 0,4 GHz, os valores de energia para fluxo nulo são menores

¹Escolhemos essa magnitude com base na literatura que envolve a rotação de nanossistemas. Consulte, por exemplo, as Refs. [137, 138]

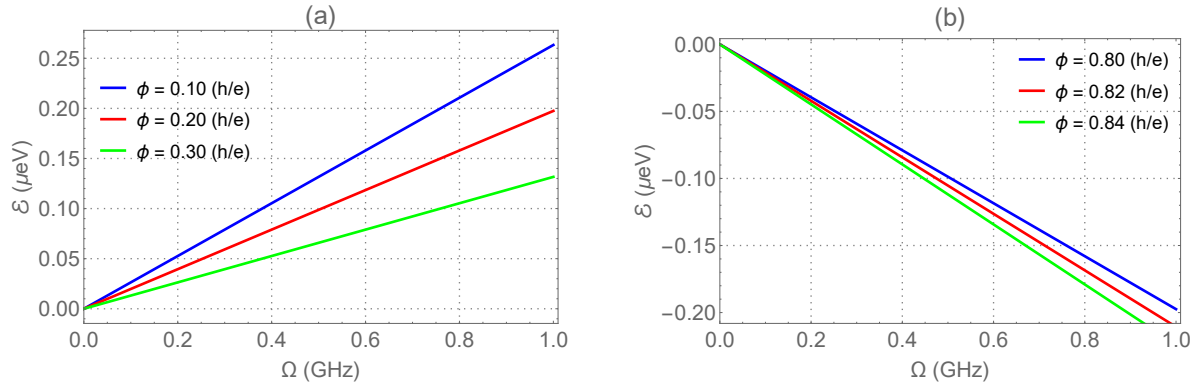


Figura 4.2: Energia como função de Ω para dois intervalos diferentes de ϕ com $m = 0$ e $R = 5$ nm. Para valores de ϕ menores que 0,5, as energias são positivas (painel (a)), enquanto para valores maiores elas são negativas (painel (b))).

e diferentes em magnitude, assim como as energias para $\phi > 0,5$ (Fig. 4.1(b)). Para valores decrescentes de Ω , as energias positivas e negativas tendem a diminuir (Fig. 4.1(c)). Na Fig. 4.1(d), mostramos o caso específico quando $\Omega = 0$ e alguns valores de R . Podemos ver que, quando R diminui, a energia tende a aumentar. Para valores de ϕ no intervalo entre 0 e 0,5, os valores das energias são muito pequenos, mas não nulos. A Tabela 4.1 mostra alguns

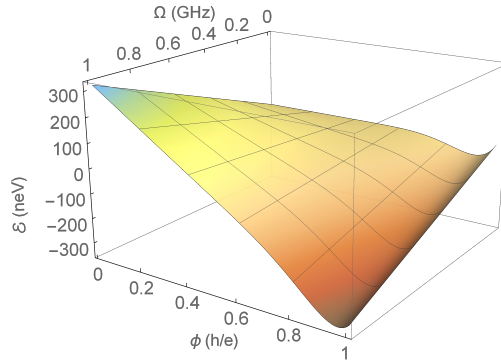


Figura 4.3: Energia como uma função Ω e ϕ para $m = 0$ e $R = 5$ nm. Para valores de ϕ maiores que 0,5, as energias são negativas, enquanto que para valores menores elas são positivas. Esse efeito se deve à presença de rotação.

valores de energia nesse intervalo. A segunda coluna refere-se ao caso em que $R = 100$ nm (linha azul), enquanto a terceira coluna corresponde a $R = 400$ nm (linha laranja). Quando investigamos o comportamento da energia como uma função de Ω , encontramos um perfil linear para qualquer valor dos parâmetros (Fig. 4.2). No entanto, para R e m fixos, há um valor limite para ϕ e Ω que pode fornecer energia positiva ou negativa. Isso pode ser facilmente

Tabela 4.1: Alguns valores para a energia \mathcal{E} , correspondentes ao caso exibido na Fig. 4.1(d), em que consideramos $\Omega = 0$. Na segunda e terceira colunas, mostramos as energias com $R = 100$ nm e $R = 400$ nm, respectivamente.

ϕ (h/e)	\mathcal{E} (neV)	\mathcal{E} (neV)
1.0000×10^{-2}	0.0000	0.0000
2.0000×10^{-2}	-6.2385×10^{-174}	-3.8990×10^{-175}
2.9999×10^{-2}	-5.7152×10^{-115}	-3.5720×10^{-116}
4.0000×10^{-2}	-1.7292×10^{-85}	-1.0807×10^{-86}
5.0000×10^{-2}	-8.4369×10^{-68}	-5.2731×10^{-69}
5.9999×10^{-2}	-5.2267×10^{-56}	-3.2666×10^{-57}
7.0000×10^{-2}	-1.3833×10^{-47}	-8.6460×10^{-49}
8.0000×10^{-2}	-2.8693×10^{-41}	-1.7933×10^{-42}
8.9999×10^{-2}	-2.3479×10^{-36}	-1.4674×10^{-37}
0.1000	-1.9991×10^{-32}	-1.2494×10^{-33}
0.1100	-3.2825×10^{-29}	-2.0516×10^{-30}
0.1200	-1.5685×10^{-26}	-9.8034×10^{-28}
0.1300	-2.8999×10^{-24}	-1.8124×10^{-25}
0.1400	-2.5423×10^{-22}	-1.5889×10^{-23}
0.1499	-1.2269×10^{-20}	-7.6686×10^{-22}
0.1600	-3.6457×10^{-19}	-2.2785×10^{-20}
0.1700	-7.2650×10^{-18}	-4.5406×10^{-19}
0.1799	-1.0377×10^{-16}	-6.4860×10^{-18}
0.1900	-1.1199×10^{-15}	-6.9995×10^{-17}
0.2000	-9.5226×10^{-15}	-5.9516×10^{-16}

identificado pela comparação direta dos dois termos de energia na Equação (4.36). A Fig. 4.3 exibe um perfil mais geral da energia como uma função do fluxo e da rotação. Podemos ver o comportamento linear (exibindo energias positivas e negativas) no plano com ϕ constante e o perfil linear-parabólico no plano em que Ω é constante.

Óptica não linear

Em cursos convencionais de eletromagnetismo e óptica, consideramos apenas a propagação da radiação eletromagnética em meios lineares, ou seja, situações em que as propriedades ópticas não dependem da intensidade do campo eletromagnético aplicado. Esta aproximação é válida apenas para campos de baixa intensidade, que produzem forças pequenas comparadas às forças que ligam os elétrons aos átomos. Quando campos mais intensos são aplicados, comparáveis com as forças atômicas, entramos em um regime chamado de óptica não linear. Neste regime, as propriedades ópticas do meio variam com a intensidade dos campos elétricos aplicados.

Esta diferença na variação das propriedades ópticas pode ser explicada da seguinte maneira [55]: Quando uma onda de luz se propaga através de um meio ótico, o campo eletromagnético oscilante exerce uma força de polarização sobre todos os elétrons que compõem o meio. Como os elétrons internos dos átomos estão fortemente ligados aos núcleos, o principal efeito de polarização é exercido sobre os elétrons externos ou de valência. Com fontes de luz comuns, os campos de radiação são muito menores do que os campos que ligam os elétrons aos átomos. Portanto, a radiação atua como uma pequena perturbação. Isso produz uma polarização que é proporcional ao campo elétrico da onda de luz. Entretanto, se o campo de radiação for comparável aos campos atômicos, então a relação entre a polarização e o campo de radiação não é mais linear.

Neste capítulo, faremos uma breve introdução à óptica não linear. Vamos discutir alguns

fenômenos ópticos não lineares e como eles são descritos pelo tensor de susceptibilidade não linear. Em seguida, vamos apresentar a teoria quântica da susceptibilidade não linear para um sistema de dois níveis interagindo com a luz. Toda a discussão terá como base o formalismo do operador densidade e, portanto, faremos uma breve revisão desse assunto. Por fim, apresentaremos duas quantidades relevantes para o estudo de sistemas ópticos não lineares: o coeficiente de absorção não linear e a mudança no índice de refração.

5.1 Tensor susceptibilidade não linear

As propriedades ópticas de um material são descritas através das partes real e imaginária da constante dielétrica ϵ_r . A constante dielétrica é derivada da polarização \mathbf{P} do meio de acordo com [55]

$$\begin{aligned}\mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \\ &= \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}.\end{aligned}\tag{5.1}$$

Na óptica linear, \mathbf{P} depende linearmente do campo elétrico \mathbf{E} da onda de luz, de forma que podemos escrever:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E},\tag{5.2}$$

onde χ é a susceptibilidade elétrica. Combinando as equações (5.1) e (5.2), obtemos a relação entre ϵ_r e χ , a saber:

$$\epsilon_r = 1 + \chi.\tag{5.3}$$

Na óptica não linear, a resposta óptica de um material é descrita por uma generalização da equação (5.2), expressando a polarização como uma série de potências da intensidade do campo:

$$\begin{aligned}P(t) &= \mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}, \\ &= \epsilon_0 [\chi^{(1)} E(t) + \chi^{(2)} E^2(t) + \chi^{(3)} E^3(t) + \dots], \\ &= P^{(1)}(t) + P^{(2)}(t) + P^{(3)}(t) + \dots\end{aligned}\tag{5.4}$$

Em um meio isotrópico, a polarização P é paralela ao campo E , de forma que podemos considerá-los como quantidades escalares. Nesta expansão, $\chi^{(1)}$ é apenas a susceptibilidade linear. As quantidades $\chi^{(2)}$ e $\chi^{(3)}$ são as susceptibilidades não lineares de segunda e terceira ordem,

respectivamente. A aparição de efeitos não lineares está ligada aos coeficientes de ordem superiores. Espera-se que os efeitos não lineares comecem a se tornar perceptíveis quando o campo elétrico aplicado no material não seja totalmente desprezível em comparação com os campos que ligam os elétrons aos átomos, tipicamente da ordem de $E_a \sim 5.14 \times 10^{11} V/m$. Para obter campos ópticos de tal magnitude, a intensidade da luz incidente deve ser da ordem de $I_a \sim 3.5 \times 10^{16} W/m^2$ [53]. Entretanto, essas altas intensidades não são necessárias para observar muitos efeitos ópticos não lineares. Um dos motivos é que, desde que o conjunto de dipolos induzidos oscile de forma coerente (ou seja, com uma relação de fase definida entre eles), o campo que eles irradiam individualmente pode, em determinadas circunstâncias, somar-se de forma construtiva para produzir uma intensidade total muito maior. Na óptica não linear, essa condição de interferência construtiva é conhecida como “conjugação de fase” [139].

Podemos também estimar a ordem de magnitude das susceptibilidades em (5.4). Em matéria condensada, $\chi^{(1)} \sim 1$, e esperamos que em condições de não ressonância a susceptibilidade de segunda ordem $\chi^{(2)}$ seja da ordem $\chi^{(1)/E_a}$, ou:

$$\chi^{(2)} \simeq 1.94 \times 10^{-12} m/V. \quad (5.5)$$

De forma semelhante, esperamos que $\chi^{(3)}$ seja da ordem de $\chi^{(1)/E_a^2}$, ou, numericamente

$$\chi^{(3)} \simeq 3.78 \times 10^{-24} m^2/V^2. \quad (5.6)$$

Vale ressaltar que a expansão em séries de potências na Eq. (5.4) não é necessariamente convergente para todas as situações. Nesses casos, a resposta não linear do material ao campo aplicado deve ser expressa de outra maneira. Espera-se que a expansão perturbativa não seja mais quando o campos aplicado possuir intensidade próxima a intensidade dos campos atômicos I_a .

Para um meio cristalino, \mathbf{P} e \mathbf{E} não são necessariamente paralelos. A polarização deve então ser escrita como

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} \cdot \mathbf{E} + \chi^{(2)} : \mathbf{E}\mathbf{E} + \chi^{(3)} : \mathbf{E}\mathbf{E}\mathbf{E} + \dots \right), \quad (5.7)$$

onde agora $\chi^{(1)}$ é o tensor de susceptibilidade usual. Os coeficientes $\chi^{(2)}$, $\chi^{(3)}$, etc. são tensores de ordem superior. A expansão é frequentemente escrita como a soma de dois termos

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^L + \mathbf{P}^{NL}, \quad (5.8)$$

onde

$$\mathbf{P}^L = \epsilon_0 \chi^{(1)} \mathbf{E} \quad (5.9)$$

caracteriza a polarização linear, enquanto o segundo,

$$\mathbf{P}^{NL} = \epsilon_0 \left(\chi^{(2)} : \mathbf{E}\mathbf{E} + \chi^{(3)} : \mathbf{E}\mathbf{E}\mathbf{E} + \dots \right), \quad (5.10)$$

representa a polarização não linear. De forma explícita, as polarizações podem ser escritas como

$$\mathbf{P}_i^{(1)} = \epsilon_0 \sum_j \chi_{ij} E_j, \quad (5.11)$$

$$\mathbf{P}_i^{(2)} = \epsilon_0 \sum_{jk} \chi_{ijk} E_j E_k, \quad (5.12)$$

$$\mathbf{P}_i^{(3)} = \epsilon_0 \sum_{jkl} \chi_{ijkl} E_j E_k E_l. \quad (5.13)$$

Vemos, então, que o tensor de susceptibilidade linear $\chi^{(1)}$ é uma matriz 3×3 e, portanto, tem 9 componentes. Já as susceptibilidades de segunda e terceira ordem $\chi^{(2)}$ e $\chi^{(3)}$ possuem 27 e 81 termos, respectivamente. A priori, pode parecer que teríamos que medir 27 quantidades diferentes para quantificar totalmente a resposta não linear de segunda ordem de um meio anisotrópico. Ou ainda pior, 81 no caso de respostas de terceira ordem. Felizmente, não é o que geralmente acontece, já que devido ao alto grau de simetria encontrado em cristais exige que muitas das componentes sejam nulas e muitas sejam iguais [53, 55]. Para os propósitos desta tese, é suficiente considerar meios isotrópicos e, portanto, vamos utilizar apenas a equação (5.4).

No domínio das frequências, a equação (5.4) é reescrita como [54, 56, 140]

$$\begin{aligned} P(\omega) = & \epsilon_0 \left[\chi^{(1)}(\omega; \omega) \cdot E(\omega) + \chi^{(2)}(\omega; \omega_i, \omega_j) : E(\omega_i) E(\omega_j) \right. \\ & \left. + \chi^{(3)}(\omega; \omega_i, \omega_j, \omega_k) : E(\omega_i) E(\omega_j) E(\omega_k) + \dots \right], \end{aligned} \quad (5.14)$$

em que ω_i são as frequências incidentes e ω é a frequência resposta do meio. O que a equação (5.14) nos diz é que além da polarização linear, oscilando com a mesma frequência do campo, teremos termos não lineares oscilando em combinações das frequências dos campos. Ou seja, se o campo consiste de duas ondas oscilando nas frequências ω_i e ω_j , a polarização de segunda ordem terá componentes que oscilam com frequências $\omega = \omega_i + \omega_j$. Da mesma forma, quando

o campo é uma combinação de três ondas oscilando com frequências ω_i , ω_j e ω_k , a polarização não linear de terceira ordem oscilará com frequências $\omega = \omega_i + \omega_j + \omega_k$.

O primeiro termo na equação (5.14) dá origem a fenômenos lineares comuns como a refração e a absorção. Alguns exemplos de fenômenos de segunda ordem são:

- (i) a geração de segundo harmônico, $\chi^{(2)}(2\omega; \omega, \omega)$;
- (ii) a geração de soma e diferença de frequências, $\chi^{(2)}(\omega_i + \omega_j; \omega_i, \omega_j)$ e $\chi^{(2)}(\omega_i - \omega_j; \omega_i, \omega_j)$;
- (iii) e a retificação óptica, $\chi^{(2)}(0; -\omega, \omega)$.

A retificação óptica refere-se à geração de um campo elétrico estático, ou campo elétrico dc, a partir de dois campos de frequência óptica ω . Exemplos de efeitos de terceira ordem são:

- (i) a geração de terceiro harmônico, $\chi^{(3)}(3\omega; \omega, \omega, \omega)$;
- (ii) geração de segundo harmônico, $\chi^{(3)}(2\omega; \omega, \omega, 0)$;
- (iii) mistura de quatro ondas, $\chi^{(3)}(\omega_i + \omega_j + \omega_k; \omega_i, \omega_j, \pm\omega_k)$, etc.

Os efeitos ópticos não lineares de terceira ordem são encontrados em qualquer material. No caso em que o material é *centro-simétrico* - materiais cujas redes cristalinas exibem uma simetria de inversão com relação ao seu centro - as susceptibilidades não lineares pares são nulas.

Nesta tese, vamos tratar apenas de fenômenos de terceira ordem. Mais especificamente, queremos utilizar o coeficiente de absorção não linear e o índice de refração não linear para estudar propriedades ópticas não lineares de anéis quânticos bidimensionais. Nas próximas seções, vamos estudar como obter as susceptibilidades não lineares de um sistema de dois níveis interagindo com um campo elétrico intenso. Para isso, utilizaremos uma abordagem quântica focada no uso do formalismo da expansão perturbativa da matriz densidade. Em seguida, vamos mostrar como obter, a partir das susceptibilidades, o coeficiente de absorção e a mudança do índice de refração.

5.2 Teoria quântica da susceptibilidade não linear

Nesta seção, apresentamos a teoria quântica das susceptibilidades ópticas não lineares de ordem superior para um sistema de dois níveis interagindo com um campo elétrico incidente.

Na óptica não linear, onde o sistema está sujeito a várias perturbações, a determinação precisa do estado do sistema muitas vezes se torna inviável. Nessas circunstâncias, é necessário recorrer ao formalismo do operador densidade para tratar o sistema de maneira estatística. Portanto, antes de prosseguirmos com a derivação das susceptibilidades, realizaremos uma breve revisão sobre o conceito e a aplicação do operador densidade.

5.2.1 Matriz densidade

Na mecânica quântica, geralmente utilizamos kets para definir o estado do sistema, o representando por uma função de onda precisa, quando conhecemos o estado do sistema com exatidão e podemos preparar ensembles de maneira idêntica. No entanto, há situações em que não é possível conhecer o estado do sistema de forma precisa devido a incertezas clássicas. Nessas situações, só podemos atribuir probabilidades para o sistema estar em determinados estados. Para tratar desses casos de mistura estática, onde temos uma combinação estatística de diferentes estados puros, utilizamos o formalismo de operador densidade.

Na óptica não linear, além da interação dos átomos com os campos elétricos, é preciso incluir perturbações no sistema que causam decoerência e processos de relaxação, que podem ter várias origens como o contato térmico com ambiente, vibrações da rede, colisões com fônons e elétrons de condução, etc. O formalismo de operador densidade permite modelar esses efeitos de maneira precisa, considerando tanto as probabilidades clássicas associadas ao meio quanto as probabilidades quânticas intrínsecas ao sistema. A seguir, vamos apresentar um breve resumo sobre o operador densidade seguindo as referências [141–143].

Agora, seja A um observável. Se o estado for $|\psi_1\rangle$, então o valor esperado de A será $\langle\psi_1|A|\psi_1\rangle$. Mas, se o estado for $|\psi_2\rangle$, então o valor esperado será $\langle\psi_2|A|\psi_2\rangle$. Para calcular o valor esperado real de A , precisamos realizar uma média dos valores quânticos esperados:

$$\langle A \rangle = \sum_i q_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle. \quad (5.15)$$

O importante a ser compreendido é que esse tipo de média não pode ser escrito como $\langle \phi | A | \phi \rangle$ para algum ket $|\phi\rangle$. Se quisermos atribuir um "estado" ao nosso sistema, devemos generalizar a ideia de ket. Para isso, utilizamos a Eq. (1.77) para escrever

$$\langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \text{tr} (A | \psi_i \rangle \langle \psi_i |). \quad (5.16)$$

Então, a Eq. (5.15) pode ser escrita como

$$\langle A \rangle = \sum_i q_i \text{tr}(A|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \text{tr}\left(A \sum_i q_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right). \quad (5.17)$$

Isso nos motiva a definir a matriz densidade como

$$\rho = \sum_i q_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (5.18)$$

Finalmente, podemos escrever a Eq. (5.15) como

$$\langle A \rangle = \text{tr}(A\rho) \quad (5.19)$$

que, aliás, é igual a $\text{tr}(\rho A)$ devido à propriedade cíclica do traço.

Com o formalismo do operador densidade, podemos reformular todos os postulados da mecânica quântica [141, 144]. Se uma matriz de densidade puder ser escrita como $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, dizemos que temos um estado puro. Nesse caso, não é necessário usar ρ . Podemos simplesmente continuar usando $|\psi\rangle$. Por exemplo, a Eq. (5.19) se reduz ao resultado usual: $\text{tr}(A\rho) = \langle\psi|A|\psi\rangle$. Um estado que não é puro é geralmente chamado de estado misto. Nesse caso, os kets não são suficientes e devemos usar ρ .

Algumas propriedades gerais do operador densidade merecem ser destacadas. A primeira é a hermiticidade

$$\rho^\dagger = \rho. \quad (5.20)$$

Em seguida, temos a normalização

$$\text{tr}(\rho) = \sum_i p_i \text{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i = 1. \quad (5.21)$$

Outra propriedade importante que as matrizes de densidades devem satisfazer é serem *positivo semi-definidas*, ou, simbolicamente, $\rho \geq 0$. Isto significa que seu valor esperado em qualquer estado quântico é sempre não negativo

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_i p_i |\langle\phi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0. \quad (5.22)$$

o que é necessário para interpretação probabilística de ρ .

A matriz densidade de um ensemble puro é claramente o operador projeção e portanto, deve ser idempotente

$$\rho^2 = \rho. \quad (5.23)$$

Portanto, apenas para ensembles puros é válido que

$$\text{tr}(\rho^2) = 1. \quad (5.24)$$

Vamos agora estudar como o operador densidade varia com o tempo. Para isto, derivamos (5.18) com relação ao tempo

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_i p_i (|\dot{\psi}_i\rangle\langle\psi_i| + |\psi_i\rangle\langle\dot{\psi}_i|), \quad (5.25)$$

onde consideramos que as probabilidades clássicas p_i não variam com o tempo. Usando a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i\rangle = H|\psi_i\rangle, \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_i| = \langle\psi_i|H, \quad (5.26)$$

temos

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_i p_i (H|\psi_i\rangle\langle\psi_i| + |\psi_i\rangle\langle\psi_i|H), \quad (5.27)$$

e finalmente

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho]. \quad (5.28)$$

A equação (5.28) é chamada de *equação de von Neumann*.

5.2.2 Interação entre um sistema de dois níveis e a luz

Vamos agora utilizar o formalismo da matriz densidade desenvolvido na seção anterior para calcular as susceptibilidades não lineares de transições ópticas em nanoestruturas em semicondutores. A equação descreve como o sistema evolui no tempo como resultado das interações incluídas no Hamiltoniano H . Entretanto, existem algumas interações responsáveis por fenômenos de relaxação que descrevem decaimento da população excitada e das coerências. Estes efeitos podem ser causados por colisões entre átomos, emissão espontânea de luz, colisões com fônons, etc. Tais interações devem ser incluídas através da adição de operadores de amortecimento fenomenológicos na equação (5.28). Há mais de uma maneira de modelar tais processos de decaimento [53, 57]. Aqui, seguimos a Ref. [145], em que a equação que governa a dinâmica do operador densidade do sistema é dada por

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] - \frac{1}{2} [\Gamma(\rho - \rho^0) + (\rho - \rho^0)\Gamma], \quad (5.29)$$

onde $\rho^{(0)}$ é o operador densidade na ausência de interações e Γ é um operador fenomenológico responsável pelo amortecimento devido à relaxação. A representação de Γ na base dos auto-estados de energia $|n\rangle$ é uma matriz diagonal e seus elementos Γ_{nn} são o inverso do tempo de relaxação τ_n para o estado $|n\rangle$. Por simplicidade, vamos nos ater a um sistema de dois níveis, portanto $n = 1, 2$. Vamos resolver a equação (5.29) perturbativamente, expandindo ρ em

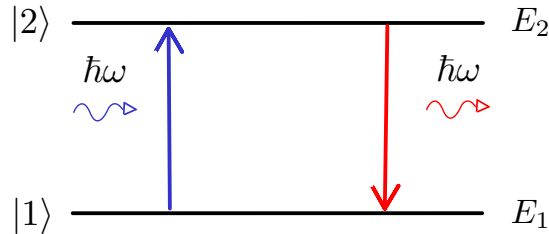


Figura 5.1: Emissão e absorção induzidas em um sistema de dois níveis pela interação com a luz.

uma série de potências. Para isto, vamos supor que o Hamiltoniano H em (5.29) possa ser dividido em duas partes

$$H = H_0 + \lambda V, \quad (5.30)$$

em que H_0 é o Hamiltoniano livre, diagonal em $|1\rangle$ e $|2\rangle$ com energia E_1 e E_2 , respectivamente, e V é o Hamiltoniano de interação entre o campo elétrico e o sistema de dois níveis dada pela aproximação de dipolo elétrico

$$V = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{t}), \quad (5.31)$$

onde $\hat{\mathbf{M}} = -e\mathbf{r}$ denota o operador de momento de dipolo elétrico do sistema. Vamos considerar que o campo elétrico incidente é monocromático e representado por

$$E(t) = \text{Re}(E_0 e^{-i\omega t}) = \frac{1}{2} E_0 e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} E_0^* e^{i\omega t} = \tilde{E} e^{-i\omega t} + \tilde{E}^* e^{i\omega t}, \quad (5.32)$$

O parâmetro real λ é a constante de acoplamento que varia entre zero e um e caracteriza a intensidade da perturbação. O método consiste em propor uma solução na forma de uma série de potências em λ ,

$$\rho = \rho^{(0)} + \lambda \rho^{(1)} + \lambda^2 \rho^{(2)} + \dots, \quad (5.33)$$

onde $\rho^{(0)}$ é a matriz densidade do sistema não perturbado em equilíbrio térmico. Os elementos diagonais dessa matriz são as ocupações dos níveis em estado de equilíbrio representados pela

distribuição de Fermi-Dirac [145]. Para que a condição de normalização (5.21) seja satisfeita, o traço de $\text{tr}\{\rho^{(0)}\} = 1$ e $\text{tr}\{\rho^{(n)}\} = 0, n > 0$ [146]. Substituímos (5.33) em (5.29) e agrupando os termos de mesma potência, obtemos o conjunto de n equações diferenciais.

$$\frac{d\rho^{(0)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho^{(0)}], \quad (5.34)$$

$$\frac{d\rho^{(1)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho^{(1)}] - \frac{1}{i\hbar}[V, \rho^{(0)}] - \frac{1}{2}[\Gamma\rho^{(1)} + \rho^{(1)}\Gamma], \quad (5.35)$$

$$\frac{d\rho^{(2)}}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho^{(2)}] - \frac{1}{i\hbar}[V, \rho^{(1)}] - \frac{1}{2}[\Gamma\rho^{(2)} + \rho^{(2)}\Gamma], \quad (5.36)$$

$$\vdots \quad (5.37)$$

$$\frac{d\rho^{(n+1)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho^{(n+1)}] - \frac{1}{i\hbar}[V, \rho^{(n)}] - \frac{1}{2}[\Gamma\rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)}\Gamma]. \quad (5.38)$$

Os $n + 1$ elementos de (5.38) na base $(|1\rangle, |2\rangle)$ são dados por

$$\frac{d\rho_{11}^{(n+1)}}{dt} = -\Gamma_{11}\rho_{11}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}(M_{12}\rho_{21}^{(n)} - M_{21}\rho_{12}^{(n)})E(t), \quad (5.39)$$

$$\frac{d\rho_{22}^{(n+1)}}{dt} = -\Gamma_{22}\rho_{22}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}(M_{21}\rho_{12}^{(n)} - M_{12}\rho_{21}^{(n)})E(t), \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{12}^{(n+1)}}{dt} &= \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \rho_{12}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{22}^{(n)} - \rho_{11}^{(n)})M_{12}E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{11} - M_{22})E(t)\rho_{12}^{(n)}, \end{aligned} \quad (5.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{21}^{(n+1)}}{dt} &= \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \rho_{21}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{11}^{(n)} - \rho_{22}^{(n)})M_{21}E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})\rho_{21}^{(n)}E(t), \end{aligned} \quad (5.42)$$

onde $M_{nm} = \langle m|\mathbf{M}|n\rangle$ e $\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = \frac{1}{2}(\Gamma_{11} + \Gamma_{22}) = \frac{1}{2}(1/\tau_1 + 1/\tau_2)$ são as taxas de amortecimento das coerências entre os dois estados. A matriz ρ possui a propriedade de hermiticidade $\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$. Podemos tentar justificar a forma do operador de amortecimento fenomenológico da seguinte maneira [53]. Seja $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ o estado do sistema, onde os coeficiente $c_n(t)$ são as amplitudes de probabilidade de encontrar os sistema em um dos níveis. A probabilidade de o sistema estar no estado $|1\rangle$ deve decair como

$$|c_1(t)|^2 = |c_1(0)|^2 e^{-\Gamma_1 t}, \quad (5.43)$$

e, assim, a amplitude de probabilidade deve variar no tempo como

$$c_1(t) = c_1(0)e^{-iE_1 t} e^{-\Gamma_1 t}. \quad (5.44)$$

Da mesma forma, amplitude de probabilidade de o sistema estar no estado 2 deve variar no tempo como

$$c_2(t) = c_2(0)e^{-iE_2t}e^{-\Gamma_2t}. \quad (5.45)$$

Assim, a coerência entre os dois níveis deve variar como

$$c_1^*(t)c_2(t) = c_1^*(0)c_2(0)e^{-i\Delta Et}e^{-(\Gamma_1+\Gamma_2)t/2}. \quad (5.46)$$

onde $\Delta E = E_2 - E_1$ é a frequência natural de oscilação dos sistema. Isto significa que o sistema retorna ao seu estado de equilíbrio a uma taxa

$$\Gamma_{12} = \Gamma_1 + \Gamma_2. \quad (5.47)$$

As equações (5.39) à (5.42) podem ser resolvidas escrevendo os elementos da matriz densidade em termos de somas proporcionais a $\exp(\pm i\omega t)$ e igualando termos em ambos os lados com a mesma dependência temporal. Estamos interessados apenas em soluções de estado estacionário - soluções válidas muito tempo depois de os efeitos temporários que ocorrem logo após a incidência do campo terem se extinguido [53]. Portanto podemos escrever o n-ésimo termo da série perturbativa como [147]

$$\rho^{(n)} = \tilde{\rho}^{(n)}e^{-i\omega t} + \tilde{\rho}^{(n)*}e^{i\omega t}. \quad (5.48)$$

Começamos tomando $n = 1$ em (5.48), e obtemos

$$\rho^{(1)} = \tilde{\rho}^{(1)}e^{-i\omega t} + \tilde{\rho}^{(1)*}e^{i\omega t}, \quad (5.49)$$

e $n = 0$ em (5.42), o que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{21}^{(1)}}{dt} &= \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{21} \right] \rho_{12}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})M_{12}E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{11} - M_{22})E(t)\rho_{21}^{(0)}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Supomos também que $\rho_{nm}^{(0)} = 0, n \neq m$. Isso significa dizer que no equilíbrio térmico, o estado excitado do sistema podem estar populados, mas a excitação térmica, que espera-se seja um processo incoerente, não pode produzir ter nenhuma superposição coerente de estados [53]. Portanto, fazemos $\rho_{21}^{(0)} = 0$, e encontramos

$$\frac{d\rho_{21}^{(1)}}{dt} = - \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{21} \right] \rho_{12}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})M_{12}\tilde{E}. \quad (5.51)$$

Substituindo o campo elétrico (5.32) e a expressão (5.49) na (5.51) e igualando os coeficientes de $\exp(-i\omega t)$, temos

$$-i\omega\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) = -\left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{21}\right]\tilde{\rho}_{12}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})M_{21}\tilde{E}, \quad (5.52)$$

que resolvida para $\tilde{\rho}_{12}^{(1)}$, resulta

$$\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) = \frac{\tilde{E}M_{21}(\rho_{22}^{(0)} - \rho_{11}^{(0)})}{(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})}, \quad (5.53)$$

Para os termos proporcionais a $\exp(i\omega t)$, obtemos

$$\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(-\omega) = \frac{\tilde{E}M_{21}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E + \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})}. \quad (5.54)$$

Quando $\omega \approx \Delta E$, podemos notar que apenas (5.53) pode entrar em ressonância com o campo incidente. Neste caso, o termo não ressonante (ou contra girante) (5.54) é bem menor que o termo ressonante e pode ser desprezado. A aproximação que consiste em desprezar o termo não ressonante é conhecida como *aproximação de onda girante* ou *secular*.

A partir da equação (5.41), e procedendo de maneira análoga como antes, obtemos

$$\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(\omega) = \frac{\tilde{E}M_{21}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E + \hbar\omega + i\hbar\Gamma_{12})}, \quad (5.55)$$

e

$$\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(-\omega) = \frac{\tilde{E}M_{21}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{\hbar(\Delta E - \hbar\omega + i\hbar\Gamma_{12})}, \quad (5.56)$$

Aplicando mais uma vez a aproximação de onda girante, podemos desprezar $\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(\omega)$ (equação (5.55)).

Seguindo com (5.39), temos

$$\frac{d\rho_{11}^{(1)}}{dt} = -\Gamma_{11}\rho_{11}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar}(M_{12}\rho_{21}^{(0)} - M_{21}\rho_{12}^{(0)})E(t). \quad (5.57)$$

Devido ao fato de que $\rho_{21}^{(0)} = \rho_{12}^{(0)} = 0$, temos

$$\frac{d\rho_{11}^{(1)}}{dt} = -\Gamma_{11}\rho_{11}^{(1)}. \quad (5.58)$$

Novamente, usando (5.48) e igualando apenas os termos com $\exp(-i\omega t)$, temos

$$\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega)(\Gamma_{11} - i\omega) = 0, \quad (5.59)$$

o que nos leva a concluir que $\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) = 0$. Utilizando os mesmos procedimentos, pode ser verificado que $\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(-\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(-\omega) = 0$.

Em seguida vamos calcular o termo de ordem $n = 2$ em (5.48). Estes termos descrevem a geração de segundos harmônicos e a retificação, fenômeno em que um campo elétrico estático é criado no material. Vamos ignorar os harmônicos superiores e considerar apenas a retificação. Portanto, termo $\rho^{(2)}$ não variam com tempo. Assim, a (5.39) pode ser reescrita como

$$0 = -\Gamma_{11}\rho_{11}^{(2)}(0) - \frac{\tilde{E}}{i\hbar} \left[(M_{12}(\rho_{21}^{(1)}(\omega) + \rho_{21}^{(1)}(-\omega)) - M_{21}(\rho_{12}^{(1)}(-\omega) + \rho_{12}^{(1)}(-\omega))) \right]. \quad (5.60)$$

Utilizamos a aproximação de onda girante, onde os termos não ressonantes $\rho_{12}^{(1)}(\omega)$ e $\rho_{21}^{(1)}(-\omega)$ podem ser desprezados e resolvemos (5.60) para $\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0)$, cuja expressão é

$$\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) = \frac{2\tilde{E}^2|M_{21}|^2(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})\Gamma_{12}}{\Gamma_{11}[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]}, \quad (5.61)$$

onde $|M_{21}|^2 = M_{21}M_{12}$. Repetindo os mesmos passos acima, podemos proceder para encontrar $\tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0)$. Observando que $|M_{21}|^2 = |M_{12}|^2$, temos

$$\tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0) = \frac{2\tilde{E}^2|M_{21}|^2(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})\Gamma_{12}}{\Gamma_{22}[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]}. \quad (5.62)$$

Retornando a equação (5.42) com $n = 1$ e lembrando que estamos interessados apenas em termos estacionários, ou seja

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{21}^{(2)}(0)}{dt} &= \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \rho_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar}(\rho_{11}^{(1)} - \rho_{22}^{(1)})E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})\rho_{21}^{(1)}E(t). \end{aligned} \quad (5.63)$$

Desde que $d\rho_{21}^{(2)}(0)/dt = 0$ e tomando $t = 0$ em (5.48), temos

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar}(\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) + \tilde{\rho}_{11}^{(1)}(-\omega) - \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) - \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(-\omega))M_{21}\tilde{E} \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})\tilde{E}(\rho_{21}^{(1)}(\omega) + \rho_{21}^{(1)}(-\omega)). \end{aligned} \quad (5.64)$$

Lembrando que demonstramos que $\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) = \tilde{\rho}_{11}^{(1)}(-\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(-\omega) = 0$ e desprezando o termo não ressonante $\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(-\omega)$, temos

$$0 = \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})(\rho_{21}^{(1)}(\omega) + \rho_{21}^{(1)}(-\omega))\tilde{E}, \quad (5.65)$$

que resulta em

$$\rho_{21}^{(2)}(-\omega) = \frac{2\tilde{E}^2|M_{21}|^2(M_{22} - M_{11})(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E - i\hbar\Gamma_{12})(\Delta E - \hbar\omega + i\hbar\Gamma_{12})}. \quad (5.66)$$

Agora, escolhamos $n = 2$ para obter os termos de terceira ordem da expansão. Partindo da equação (5.41) e igualando os termos proporcionais a $\exp(-i\omega t)$, temos

$$-i\omega\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) = \left[\frac{1}{i\hbar}(\Delta E) - \Gamma_{12} \right] \tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) - \frac{1}{i\hbar}(\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \rho_{22}^{(2)}(0))\tilde{E} - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0)\tilde{E}, \quad (5.67)$$

da qual isolando $\rho_{21}^{(3)}$, encontramos

$$\rho_{21}^{(3)} = \frac{\tilde{E}}{(\Delta E - \hbar\omega + i\hbar\Gamma_{12})} \left[(\rho_{11}^{(2)}(0) - \rho_{22}^{(2)}(0))M_{21} + (M_{22} - M_{11})\rho_{21}^{(2)}(0) \right]. \quad (5.68)$$

Agora, podemos calcular a diferença entre os termos $\rho_{11}^{(2)}(0) - \rho_{22}^{(2)}(0)$ na (5.68) usando as equações. Partimos de (5.62) e (5.61) para obter o seguinte resultado:

$$\rho_{11}^{(2)}(0) - \rho_{22}^{(2)}(0) = -2\tilde{E}^2 \left(\frac{1}{\Gamma_{11}} + \frac{1}{\Gamma_{22}} \right) \frac{|M_{21}|^2(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})\Gamma_{12}}{\Gamma_{22}[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]}. \quad (5.69)$$

Substituindo (5.69) e (5.65) em (5.68), temos

$$\rho_{21}^{(3)} = -\frac{\tilde{E}\tilde{E}^2 M_{21}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \left[2 \frac{(1/\Gamma_{11} + 1/\Gamma_{22})|M_{21}|^2\Gamma_{12}}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2} - \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(\Delta E - i\hbar\Gamma_{12})(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \right]. \quad (5.70)$$

Usando o resultado (5.70) e procedendo de modo similar, podemos calcular os termos $\rho_{11}^{(3)}$ e $\rho_{22}^{(3)}$ dados, respectivamente, por

$$\rho_{11}^{(3)} = -\frac{2i\tilde{E}\tilde{E}^2|M_{21}|^2}{(\Delta E + i\hbar\Gamma_{12})} \text{Im} \left[\frac{(M_{22} - M_{11})(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E - \hbar\omega)(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \right] \quad (5.71)$$

e

$$\rho_{22}^{(3)} = \frac{2i\tilde{E}\tilde{E}^2|M_{21}|^2}{(\Delta E + i\hbar\Gamma_{12})} \text{Im} \left[\frac{(M_{22} - M_{11})(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(\Delta E - \hbar\omega)(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \right], \quad (5.72)$$

onde Im representa a parte imaginária. De posse dos resultados acima, podemos encontrar as quantidades relevantes para analisar as propriedades ópticas não lineares de um sistema quântico. Queremos calcular a polarização por unidade de volume induzida pelo campo elétrico incidente em um material, que é definida como o valor esperado por unidade de volume do operador momento de dipolo. Podemos calculá-la através da definição de valor esperado no formalismo da matriz densidade

$$P(t) = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho(t)\mathbf{M}]. \quad (5.73)$$

onde V é o volume do sistema. Vamos decompor a polarização em suas componentes de Fourier

$$P(t) = \epsilon_0 \chi(\omega) \tilde{E} e^{-i\omega t} + \epsilon_0 \chi(-\omega) \tilde{E} e^{i\omega t}. \quad (5.74)$$

Substituindo a equação (5.33) em (5.74), a polarização é dada em termos de uma série de potências em λ

$$P(t) = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(0)}(t)\mathbf{M}] + \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(1)}(t)\mathbf{M}] + \frac{2}{V} \text{tr}[\rho^{(2)}(t)\mathbf{M}] + \dots + \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(n)}(t)\mathbf{M}] \quad (5.75)$$

$$= P^{(0)}(t) + P^{(1)}(t) + \dots + P^{(n)}(t), \quad (5.76)$$

onde $P^{(0)} = \text{tr}[\rho^{(0)}(t)\mathbf{M}]/V$ é independente do campo elétrico e é chamado de polarização elétrica permanente (ou polarização elétrica espontânea) [54], que aparece na ausência de um campo óptico; tomamos $P^{(0)} = 0$ já que ela não existe na maioria dos materiais. Podemos então encontrar a susceptibilidade de n -ésima ordem por comparação entre os termos de (5.4) e (5.76)

$$P^{(1)} = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(1)}\mathbf{M}] = \epsilon_0 \chi^{(1)} E, \quad (5.77)$$

$$P^{(2)} = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(2)}\mathbf{M}] = \epsilon_0 \chi^{(2)} E^2, \quad (5.78)$$

$$P^{(3)} = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(3)}\mathbf{M}] = \epsilon_0 \chi^{(3)} E^3, \quad (5.79)$$

$$\vdots \quad (5.80)$$

$$P^{(n)} = \frac{1}{V} \text{tr}[\rho^{(n)}\mathbf{M}] = \epsilon_0 \chi^{(n)} E^n. \quad (5.81)$$

Usando a definição do traço como a soma dos elementos da diagonal de uma matriz, podemos escrever a polarização como

$$P(t) = \frac{1}{V} [\langle 1|\rho\mathbf{M}|1\rangle + \langle 2|\rho\mathbf{M}|2\rangle]. \quad (5.82)$$

Inserindo a relação de completeza na equação acima, a polarização de n -ésima ordem é dada por

$$P^{(n)} = \frac{1}{V} \sum_n \left[\rho_{11}^{(n)} M_{11} + \rho_{12}^{(n)} M_{12} + \rho_{21}^{(n)} M_{21} + \rho_{22}^{(n)} M_{22} \right] \quad (5.83)$$

ou ainda usando a equação (5.48)

$$P^{(n)}(t) = \frac{1}{V} \sum_n \left[\tilde{\rho}_{11}^{(n)}(\omega) M_{11} + \tilde{\rho}_{12}^{(n)}(\omega) M_{12} + \tilde{\rho}_{21}^{(n)}(\omega) M_{21} + \tilde{\rho}_{22}^{(n)}(\omega) M_{22} \right] e^{-i\omega t} \quad (5.84)$$

$$+ \text{termos proporcionais a } e^{i\omega t}. \quad (5.85)$$

Tomando $n = 1$, desprezando os termos não ressonantes, lembrando que $\tilde{\rho}_{11}^{(n)}(\omega)$ e $\tilde{\rho}_{22}^{(n)}(\omega)$ são nulos e igualando os termos proporcionais a $e^{-i\omega t}$, temos

$$\chi^{(1)} = \frac{|M_{21}|^2 \sigma_\nu}{\epsilon_0(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})}, \quad (5.86)$$

onde temos definido $\sigma_\nu = (\tilde{\rho}_{11}^{(0)} - \tilde{\rho}_{22}^{(0)})/V$ como sendo a densidade de elétrons no sistema.

Em seguida, tomando $n = 3$, a susceptibilidade é dada por

$$\chi^{(3)} = \frac{\tilde{E}^2 |M_{21}|^2 \sigma_\nu}{\epsilon_0(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \times \left[\frac{2(\frac{1}{\Gamma_{11}} + \frac{1}{\Gamma_{22}})\Gamma_{12}}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2} - \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(\Delta E - i\hbar\Gamma_{12})(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \right] \quad (5.87)$$

que pode ser escrita como

$$\chi^{(3)} = \frac{\tilde{E}^2 |M_{21}|^4 \sigma_\nu}{\epsilon_0(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \times \left[\frac{2(\frac{1}{\Gamma_{11}} + \frac{1}{\Gamma_{22}})\Gamma_{12}}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2} - \frac{|M_{22} - M_{11}|^2}{|M_{21}|^2} \frac{1}{(\Delta E - i\hbar\Gamma_{12})(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \right]. \quad (5.88)$$

Pode ser verificado que o termo envolvendo $|M_{22} - M_{11}|^2 / |M_{21}|^2$ [145] é pequeno e não dá contribuições significativas ao coeficiente de absorção para os valores de campo elétrico tipicamente utilizados, de modo que pode ser negligenciado. Pelo mesmo motivo, negligenciamos as contribuições de $\tilde{\rho}_{11}^{(3)}$ e $\tilde{\rho}_{22}^{(3)}$. Assim, a expressão relevante é

$$\chi^{(3)} = \frac{\tilde{E}^2 |M_{21}|^4 \sigma_\nu}{\epsilon_0(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \frac{2(\frac{1}{\Gamma_{11}} + \frac{1}{\Gamma_{22}})\Gamma_{12}}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2}. \quad (5.89)$$

De posse das susceptibilidades (5.86) e (5.89), podemos determinar as quantidades relevantes para o estudo das propriedades ópticas do sistema, tais como o coeficiente de absorção linear (OAC, na sigla em inglês) e o índice de refração (RIC, na sigla em inglês). Isso é feito nas próximas seções.

5.2.3 Coeficiente de absorção e mudança do índice de refração

A susceptibilidade está relacionada com o coeficiente de absorção $\alpha(\omega)$ por

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \text{Im} [\epsilon_0 \chi(\omega)], \quad (5.90)$$

onde μ é a permeabilidade do sistema. Substituindo (5.86) em (5.90), obtemos o coeficiente de absorção de primeira ordem

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \frac{|M_{21}|^2 \sigma_\nu}{(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2}. \quad (5.91)$$

Da mesma forma, utilizando (5.89), encontramos o coeficiente de absorção de terceira ordem

$$\alpha^{(3)}(\omega) = -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \tilde{E}^2 \sigma_\nu \text{Im} \left[\frac{1}{(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \frac{2(\Gamma_{11} + \Gamma_{22})}{\Gamma_{11}\Gamma_{22} [(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]} \right] \quad (5.92)$$

Definindo a intensidade I do campo eletromagnético através da equação

$$\tilde{E}^2 = \frac{I}{2\epsilon_0 n_r c}, \quad (5.93)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo e n_r é o índice de refração do meio, temos

$$\alpha^{(3)}(\omega) = -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \left(\frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \right) |M_{21}|^2 \sigma_\nu \text{Im} \left[\frac{1}{(\Delta E - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{12})} \frac{2(\Gamma_{11} + \Gamma_{22})}{\Gamma_{11}\Gamma_{22} [(\Delta E - \omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]} \right]. \quad (5.94)$$

Para tornar a expressão mais simples, escolhemos $\Gamma_{11} = \Gamma_{22}$, o que implica que $\Gamma_{11} = \Gamma_{22} = \Gamma_{12}$.

Conseqüentemente, temos

$$\frac{\Gamma_{12}(\Gamma_{11} + \Gamma_{22})}{\Gamma_{11}\Gamma_{22}} = 2. \quad (5.95)$$

Deste modo, depois que destacamos a parte imaginária e fazemos algumas simplificações, chegamos a expressão

$$\alpha^{(3)}(\omega) = -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \left(\frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \right) \frac{4|M_{21}|^4 \sigma_\nu \hbar\Gamma_{12}}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]^2}. \quad (5.96)$$

O coeficiente de absorção não linear total é dado pela soma de (5.90) e (5.96)

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I). \quad (5.97)$$

A outra propriedade óptica de interesse é a mudança no índice de refração, que está relacionada com a parte real da susceptibilidade por

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = \text{Re} \left(\frac{\chi(\omega)}{2n_r^2} \right). \quad (5.98)$$

Substituindo a equação (5.86) na expressão (5.98), obtemos a mudança no índice de refração linear

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{|M_{21}|^2 \sigma_\nu}{2n_r^2 \epsilon_0} \frac{\Delta E - \hbar\omega}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2}. \quad (5.99)$$

Em seguida, para calcular o termo de terceira ordem, substituímos (5.89) em (5.98) e, como resultado, obtemos

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} = -\frac{I|M_{21}|^4 \sigma_\nu}{n_r^3 \epsilon_0 c} \text{Re} \left[\frac{\Delta E - \hbar\omega + i\hbar\Gamma_{12}}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]^2} \right], \quad (5.100)$$

que fazendo uso de $c^2 = 1/\epsilon_0\mu$, assume a forma

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} = -\frac{|M_{21}|^4 \sigma_\nu}{n_r^3 \epsilon_0} \frac{(\Delta E - \hbar\omega)\mu c I}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{12})^2]}. \quad (5.101)$$

Por fim, a mudança total no índice de refração é dada em termos de (5.99) e (5.101) pela expressão

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}. \quad (5.102)$$

Os resultados desenvolvidos nesse capítulo serão usados no próximo para analisar as propriedades ópticas de um anel quântico bidimensional em um referencial girando.

Propriedades ópticas de um anel quântico bidimensional em um referencial girando

Neste capítulo, estudamos o modelo que descreve o movimento de um elétron na presença de campos eletromagnéticos sob efeitos de rotação. Os potenciais envolvidos são devidos ao efeito AB e o potencial radial de um anel quântico. Diferente do modelo do estudado Capítulo 4, aqui, não consideramos o spin da partícula na abordagem. Devemos escrever o Hamiltoniano do sistema, resolver a equação de Schrödinger para então obtermos as energias e funções de onda da partícula. Subsequentemente, devemos estudar as propriedades eletrônicas e propriedades óticas não lineares.

Os resultados desse estudo levaram à publicação do nosso primeiro artigo, na revista *Annals of Physics* [148].

6.1 Equação de movimento

Nesta seção, devemos escrever a equação de movimento de uma partícula interagindo com um campo magnético uniforme e o potencial de AB. Além disso, a partícula também está sujeita a um potencial radial confinante e efeitos de rotação. Os efeitos de rotação e eletromagnéticos

são incluídos na equação de Schrödinger através da substituição

$$p^v \rightarrow p^v - \mu A_{\text{eff}}^v, \quad (v = 0, 1, 2, 3), \quad (6.1)$$

onde A_{eff}^v é o quadripotencial efetivo, que inclui o quadripotencial eletromagnético A_{ele}^v e o campo de calibre para o referencial girando $A_{\text{rot}}^v = (A_{\text{rot}}^0, \mathbf{A})$. O quadripotencial eletromagnético é especificado por $A_{\text{eff}}^v = (A_{\text{eff}}^0, \mathbf{A}_{\text{eff}} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2)$. Como especificaremos a seguir, o potencial vetorial efetivo \mathbf{A}_{eff} é dado em termos do potencial de AB e do potencial devido a um campo magnético uniforme na direção z , com $\nabla \cdot \mathbf{A}_{\text{ele}} = 0$ e $A_{\text{ele}}^0 = 0$. Definimos o tubo de fluxo magnético para o problema de AB como

$$e\mathbf{A}_1 = \left(0, -\frac{\phi}{\rho}, 0\right), \quad e\mathbf{B}_1 = \left(0, 0, -\phi \frac{\delta(\rho)}{\rho}\right). \quad (6.2)$$

A quantidade $\phi = e\Phi/2\pi\hbar = \Phi/\Phi_0$ está relacionada ao fluxo de AB, onde Φ denota o fluxo magnético e $\Phi_0 = h/e$ indica o quantum do fluxo magnético. O vetor potencial que gera o campo magnético uniforme na direção z é especificado por

$$\mathbf{A}_2 = \left(0, \frac{1}{2}B\rho, 0\right), \quad \mathbf{B}_2 = (0, 0, B). \quad (6.3)$$

A terceira configuração caracteriza o campo de calibre para o referencial girando

$$A_{\text{rot}}^v = \left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2, \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}\right), \quad (6.4)$$

em que $\boldsymbol{\Omega}$ é a velocidade angular. Aqui, assumimos que $\boldsymbol{\Omega}$ tem apenas o componente z , de modo que, em coordenadas cilíndricas o vetor de coordenadas é $\mathbf{r} = \rho \hat{\boldsymbol{\rho}}$ e, conseqüentemente, escrevemos $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} = \Omega \rho \hat{\boldsymbol{\phi}}$. Além disso, é bem conhecido na literatura que o problema de AB tem invariância translacional na direção z , portanto, podemos excluir o grau de liberdade z impondo $p_z = z = 0$ [27, 111, 112]. Assim, estudaremos o movimento dos elétrons restritos a se moverem apenas no plano. Portanto, devemos estudar os efeitos combinados que envolvem a rotação $\boldsymbol{\Omega}$, os potenciais \mathbf{A}_1 e \mathbf{A}_2 e o campo \mathbf{B}_2 . A equação de movimento a ser resolvida é escrita como

$$\frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}_{\text{ele}} - \mu\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \psi - \frac{1}{2}\mu(\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi = E\psi, \quad (6.5)$$

onde $V(\mathbf{r})$ representa o potencial radial de um anel 2D definido por (consulte a Fig. 5.1)

$$V(\rho) = \frac{\mu\omega_0^2}{8} \left(\rho - \frac{\rho_0^2}{\rho}\right)^2, \quad (6.6)$$

onde ρ_0 define o raio médio do anel e também representa o ponto em que o potencial mínimo está localizado. A quantidade ω_0 caracteriza a força do confinamento transversal. Além de caracterizar um modelo exatamente solúvel, o potencial radial (6.6) descreve um anel localizado de largura finita, fornecendo uma ferramenta teórica conveniente para estudar estados eletrônicos, bem como sua dependência do campo magnético em um anel 2D [149, 150]. Após

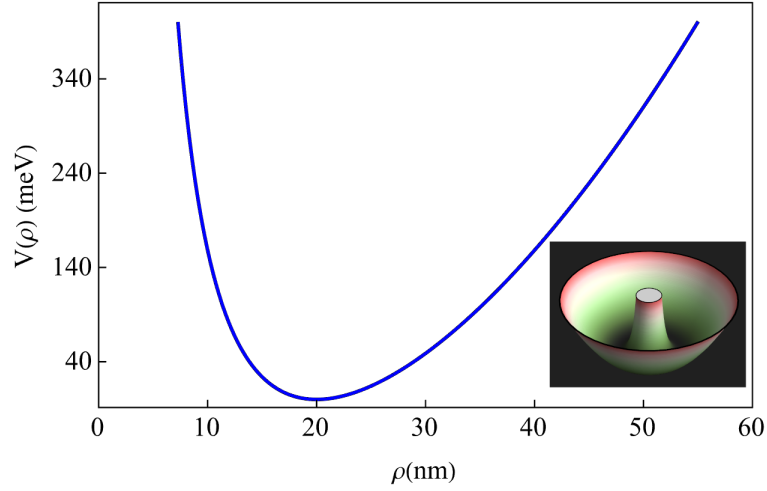


Figura 6.1: Perfil do potencial radial que descreve um anel de raio médio $\rho_0 = 20$ nm e $\hbar\omega_0 = 40$ meV.

substituir as configurações de campo e potencial na equação (4.3), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(\frac{\partial}{i \partial \varphi} - \phi \right)^2 + \frac{\mu^2 \omega_0^2 \rho_0^4}{4 \hbar^2} \right] \psi - \rho^2 \left(\frac{\mu^2 \omega_c^2}{4 \hbar^2} + \frac{\mu^2 \Omega \omega_c}{\hbar^2} + \frac{\mu^2 \omega_0^2}{4 \hbar^2} \right) \psi \\ + \frac{\mu \omega_c}{\hbar} \frac{\partial \psi}{i \partial \varphi} + \frac{2 \mu \Omega}{\hbar} \frac{\partial \psi}{i \partial \varphi} - \frac{2 \mu \Omega \phi}{\hbar} \psi - \frac{\mu \omega_c \phi}{\hbar} \psi + \frac{\mu^2 \omega_0^2 \rho_0^2}{2 \hbar^2} \psi = -\frac{2 \mu E}{\hbar^2} \psi. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Supondo que as autofunções sejam da forma

$$\psi(\rho, \varphi) = F(\rho) e^{i m \varphi}, \quad (6.8)$$

em que $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ é o número quântico de momento angular. A função $F(\rho)$ em (6.8) satisfaz a equação radial

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dF}{d\rho} \right) - \frac{L_m^2}{\rho^2} F - \frac{\mu^2 \varpi^2 \rho^2}{4 \hbar^2} F + k^2 F = 0, \quad (6.9)$$

em que $\lambda = \sqrt{\hbar/\mu\varpi}$ é o comprimento magnético efetiva renormalizada pela rotação, $L_m = \sqrt{(m - \phi)^2 + \mu^2 \omega_0^2 \rho_0^4 / 4 \hbar^2}$ é o momento angular efetivo, $\varpi = \sqrt{\omega_c^2 + 4 \Omega \omega_c + \omega_0^2}$ é a frequência ciclotron efetiva, $\omega_c = eB/\mu$ é a frequência ciclotron e

$k^2 = \mu(2\Omega + \omega_c)(m - \phi)/\hbar + 2\mu(\mu\omega_0^2\rho_0^2/4E_{nm})/\hbar^2$. A equação diferencial (6.9) pode ser resolvida analiticamente, e suas autofunções e autovalores são

$$\psi_{nm}(\rho, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\Gamma(n + L_m + 1)}{2^{L_m+1} n! [\Gamma(L_m + 1)]^2 \pi}} \left(\frac{\rho}{\lambda}\right)^{L_m} e^{im\varphi} e^{-\frac{\rho^2}{4\lambda^2}} {}_1F_1\left(-n, L_m + 1, \frac{\rho^2}{2\lambda^2}\right), \quad (6.10)$$

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2\mu\lambda^2} (2n + L_m + 1) - \frac{\hbar}{2} (2\Omega + \omega_c)(m - \phi) - \frac{\mu}{4}\omega_0^2\rho_0^2. \quad (6.11)$$

É importante expressar a energia de forma mais explícita como:

$$E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m - \phi)^2 + \frac{\mu^2\omega_0^2\rho_0^4}{4\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \times \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2 + 4\Omega\omega_c} - \frac{\hbar}{2} (2\Omega + \omega_c)(m - \phi) - \frac{\mu}{4}\omega_0^2\rho_0^2. \quad (6.12)$$

Na ausência de efeitos de rotação, obtemos:

$$E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m - \phi)^2 + \frac{\mu^2\omega_0^2\rho_0^4}{4\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2} - \frac{\hbar\omega_c}{2} (m - \phi) - \frac{\mu}{4}\omega_0^2\rho_0^2, \quad (6.13)$$

que recupera o resultado na Ref. [149], conforme esperado.

6.2 Análise numérica dos resultados

Nesta seção, investigamos numericamente os resultados obtidos na Seção 6.1 para o caso de um anel quântico 2D com um raio médio de $\rho_0 = 20$ nm e $\hbar\omega_0 = 40$ meV. Usamos os dados coletados de uma heteroestrutura 2D de GaAs, que podem ser facilmente encontrados na literatura. Concluimos nossa análise estudando o impacto da rotação sobre as propriedades ópticas lineares e não lineares de um elétron em um anel quântico 2D. Todos os cálculos foram realizados usando os seguintes parâmetros físicos [149, 151]: $\mu = 0,067 \mu_e$, em que $\mu_e = 9,1094 \times 10^{-31}$ kg é a massa dos elétrons, $n_r = 3,2$ é o índice de refração, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ F/m é a permissividade do espaço livre, e $c = 2,99 \times 10^8$ m/s é a velocidade da luz. Também consideramos os valores específicos: a intensidade óptica incidente $I = 40$ GW/m², o tempo de relaxamento $\Gamma_0 = 1/02$ ps, a densidade de estados $\sigma_\nu = 5.0 \times 10^{22}$ m⁻³ e a permeabilidade do sistema $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Tm/A [152, 153].

Usando a autofunção normalizada (6.10), podemos avaliar a distribuição de probabilidade de encontrar a partícula em determinados estados n e m . Isso nos permite analisar o comportamento do sistema e entender suas propriedades. A Fig. 6.2 ilustra como a distribuição de probabilidade muda quando assumimos uma rotação positiva e estados com $(n = 0, m = 0)$ e $(n = 2, m = 1)$ (na parte superior, temos uma visualização em 3D do perfil de probabilidade). À medida que a rotação aumenta, existe uma probabilidade maior da partícula ser encontrada mais próxima do raio interno do anel (borda interna) como ilustrado na Fig. 6.2(a). A amplitude da probabilidade torna-se mais concentrada e com menos espaçamento entre os valores adjacentes à medida que Ω aumenta. Além disso, observa-se uma maior probabilidade da partícula ser encontrada nas regiões mais próximas do raio externo à medida que m aumenta. Quando investigamos a probabilidade para $n = 2$, observa-se que a amplitude do terceiro pico

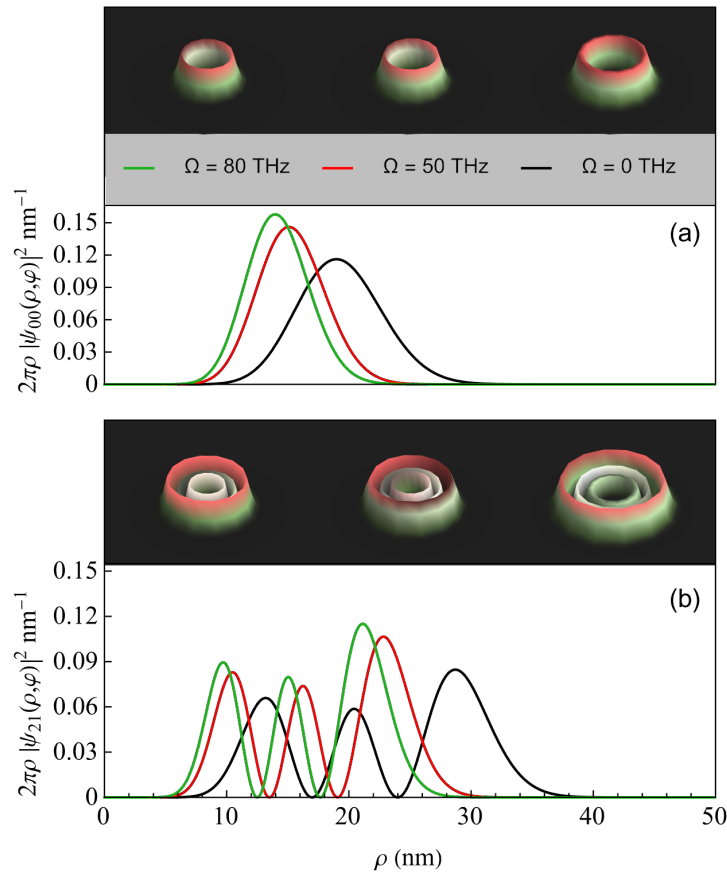


Figura 6.2: Densidade de probabilidade para rotações positivas. Em (a), temos o esboço para $(n = 0, m = 0)$ e, em (b), para $(n = 2, m = 1)$.

da onda excede a dos anteriores à medida que nos movemos ao longo do eixo horizontal para

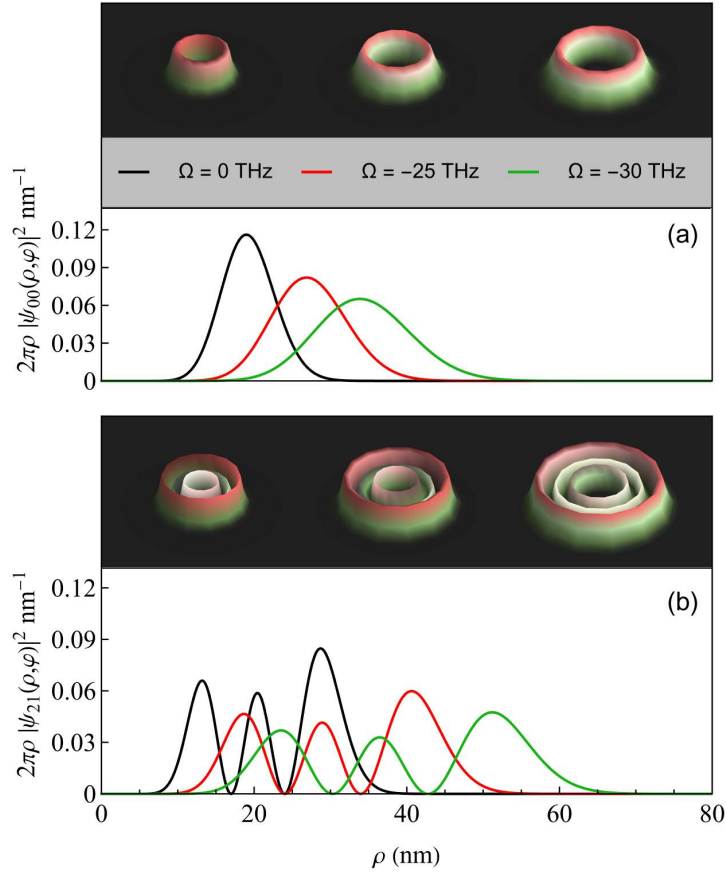


Figura 6.3: Densidade de probabilidade para rotações negativas. Em (a), temos o esboço para $(n = 0, m = 0)$ e, em (b), para $(n = 2, m = 1)$. Nas duas Figs., usamos $\phi = 0.5$ (h/e) e $B = 15$ Tesla.

valores crescentes de ρ . Além disso, observamos um padrão com regiões de maior densidade de probabilidade a medida que aumentamos a rotação. Essas regiões estão mais afastadas do centro do anel. Podemos confirmar isso observando as curvas verde ($\Omega = 80$ THz), vermelha ($\Omega = 50$ THz) e preta ($\Omega = 0$ THz) na Fig. 6.2(b). Pode ser verificado que esse efeito se repete para $n > 2$. Esse comportamento é esperado (veja a Fig. 6.1), pois o potencial na equação (6.6) se aproxima do potencial de um oscilador harmônico [154] para valores grandes de ρ (ou seja, quando o raio externo for cada vez maior).

A distribuição de probabilidade também pode ser investigada assumindo valores negativos de rotação. Na Fig. 6.3, mostramos como a distribuição de probabilidade muda quando valores negativos de rotação são considerados para estados com $(n = 0, m = 0)$ e $(n = 2, m = 1)$ (na parte superior, temos uma visualização em 3D do perfil de probabilidade). À medida que

a rotação diminui, a distribuição muda para valores mais altos de ρ , indicando que é mais provável que a partícula seja encontrada mais perto do raio externo do anel (borda externa). Neste caso, a amplitude da probabilidade torna-se menos localizada, com espaçamento maior entre os valores adjacentes (comparado com as demais curvas) à medida que Ω diminui. Além disso, também pode ser verificado que quando m aumenta, as distribuições tendem a deslocar-se para a borda externa do anel. Os perfis para a probabilidade correspondentes a $n > 2$ não são mostrados nessa tese.

Ao examinar o espectro de energia (6.12), verificamos que os estados eletrônicos do sistema dependem do parâmetro de rotação (Fig. 6.4). Para os estados em questão e o intervalo de rotação considerados, observamos que os níveis de energia aumentam com a rotação. Em particular, para o estado com $(n = 0, m = 0)$, observamos que ele se torna mais energético do que os estados com $(n = 0, m = 1)$ e $(n = 1, m = 2)$ quando a rotação atinge valores da ordem de 40 THz. No intervalo com rotações positivas, o nível de energia mais baixo não é o E_{00} . Nesse caso, as energias com números quânticos mais altos, como por exemplo, E_{21} , são mais energéticas, e por conseguinte, a probabilidade de encontrar a partícula é maior perto do centro do anel devido ao efeito centrífugo. Esse resultado é esperado, pois a rotação tem um efeito significativo no espectro de energia como mostrado na Fig. 6.4. Essa modificação na energia do sistema devido a rotação é considerada o resultado mais relevante, e portanto, a motivação principal para estudar suas implicações físicas nas propriedades óticas, a saber, mudanças na absorção óptica e no índice de refração. Para analisar as propriedades óticas, vamos usar os resultados obtidos no Cap. 5. Por simplicidade, escolhemos os níveis de energia e as funções de onda que fazem parte da transição como

$$\psi_1 = \psi_{00}, \quad \psi_2 = \psi_{21}, \quad \Delta E = E_{21} - E_{00}. \quad (6.14)$$

As regras de seleção das transições óticas são calculadas a partir dos elementos da matriz de dipolo. Pode ser mostrado que as transições permitidas são $\Delta m = \pm 1$ [155]. Supondo a polarização da radiação incidente ao longo do eixo x no plano, os elementos da matriz de transição do dipolo elétrico são

$$M_{21} = \langle \psi_2 | \rho \cos \varphi | \psi_1 \rangle, \quad (6.15)$$

e considerando que no cálculo das regras de seleção de dipolo elétrico para M_{11} e M_{22} aparecerão

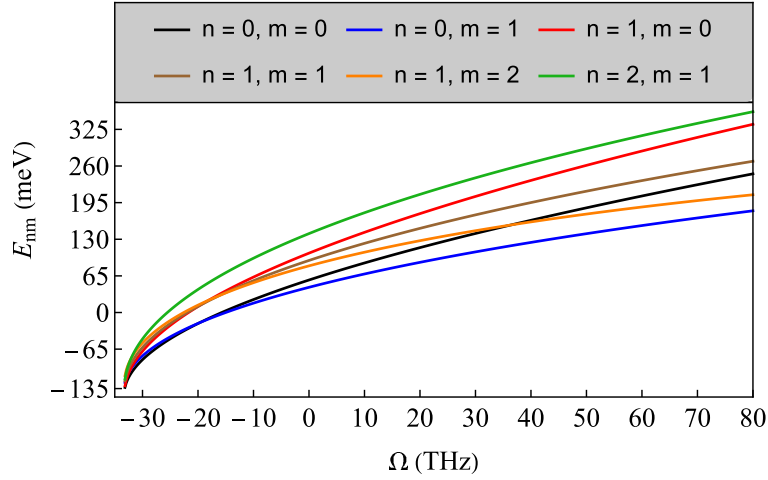


Figura 6.4: Espectro de energia em função da rotação para alguns valores de n e m . Consideramos $\phi = 0.5(h/e)$ e $B = 15$ Tesla.

integrais do tipo $\int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$ (devido à simetria azimutal do sistema), temos que

$$M_{11} = M_{22} = 0. \quad (6.16)$$

Levando em conta esse resultado (equação (6.16)), a equação (5.97) assume a forma

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I), \quad (6.17)$$

onde o coeficiente de absorção linear da equação (5.91) torna-se

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \hbar\omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_r}} \frac{\sigma_\nu \Gamma_{21} |M_{21}|^2}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2}, \quad (6.18)$$

e o coeficiente de absorção não linear de terceira ordem da equação (5.96) passa a ser escrito como

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\hbar\omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_r}} \frac{4I}{2\epsilon_0 n_r c} \frac{\sigma_\nu \Gamma_{21} |M_{21}|^4}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2]^2}. \quad (6.19)$$

De maneira análoga, o coeficiente de refração total (equação (5.102)) resulta

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}, \quad (6.20)$$

onde os termos no lado direito são dados, respectivamente, por

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{\sigma_\nu |M_{21}|^2}{2n_r^2 \epsilon_0} \frac{\Delta E - \hbar\omega}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2}, \quad (6.21)$$

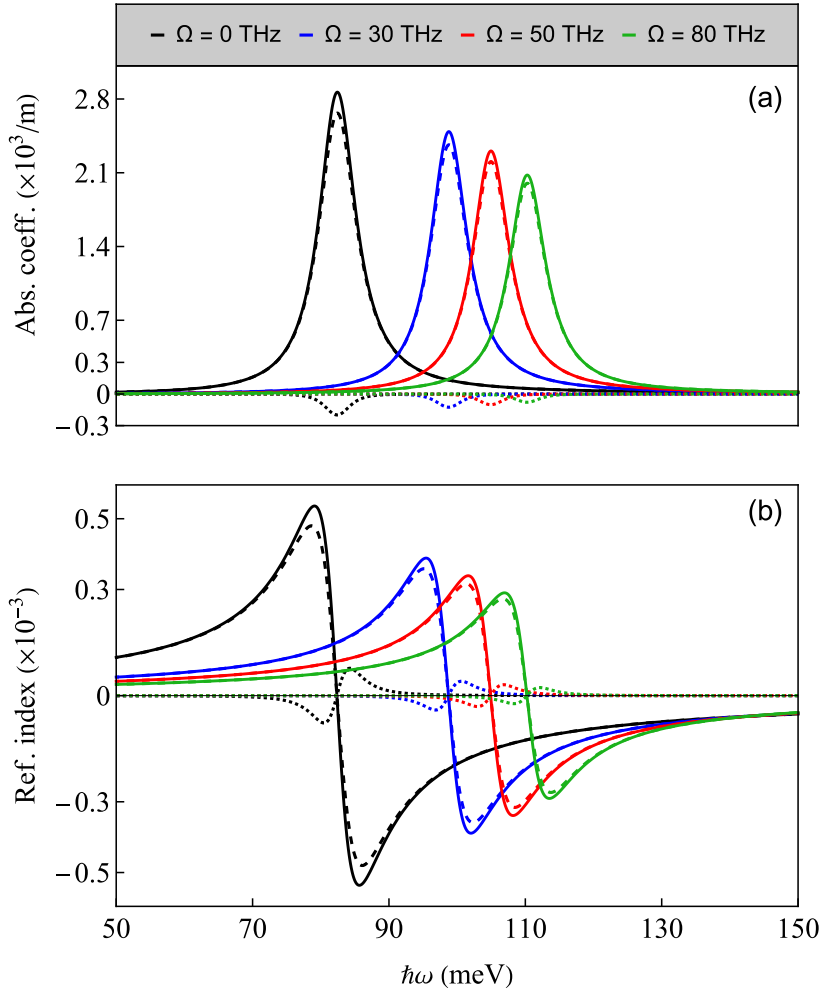


Figura 6.5: Esboço da absorção e índice de refração em função da energia do fóton. Em (a), temos o coeficiente de absorção linear (linha sólida), não linear de terceira ordem (linha pontilhada) e total (linha tracejada). Em (b), temos o índice de refração linear (linha sólida), não linear de terceira ordem (linha pontilhada) e total (linha tracejada). As curvas com suas respectivas cores referem-se aos valores de rotações considerados.

(obtida da equação (5.99)), e

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = -\frac{\mu c I \sigma_\nu |M_{21}|^4}{\epsilon_0 n_r^3} \frac{\Delta E - \hbar\omega}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2]^2}. \quad (6.22)$$

(obtida da equação (5.101)).

Na Fig. 6.5, calculamos numericamente os OACs e os RICs em função da energia do fóton para quatro valores diferentes de rotação, a saber, $\Omega = 0$ THz, $\Omega = 30$ THz, $\Omega = 50$ THz e $\Omega = 80$ THz. Nossos cálculos se concentram no estudo do processo óptico envolvido na transição entre estados com $(n = 0, m = 0)$ e $(n = 2, m = 1)$. Na Fig. 6.5(a) mostramos os perfis dos

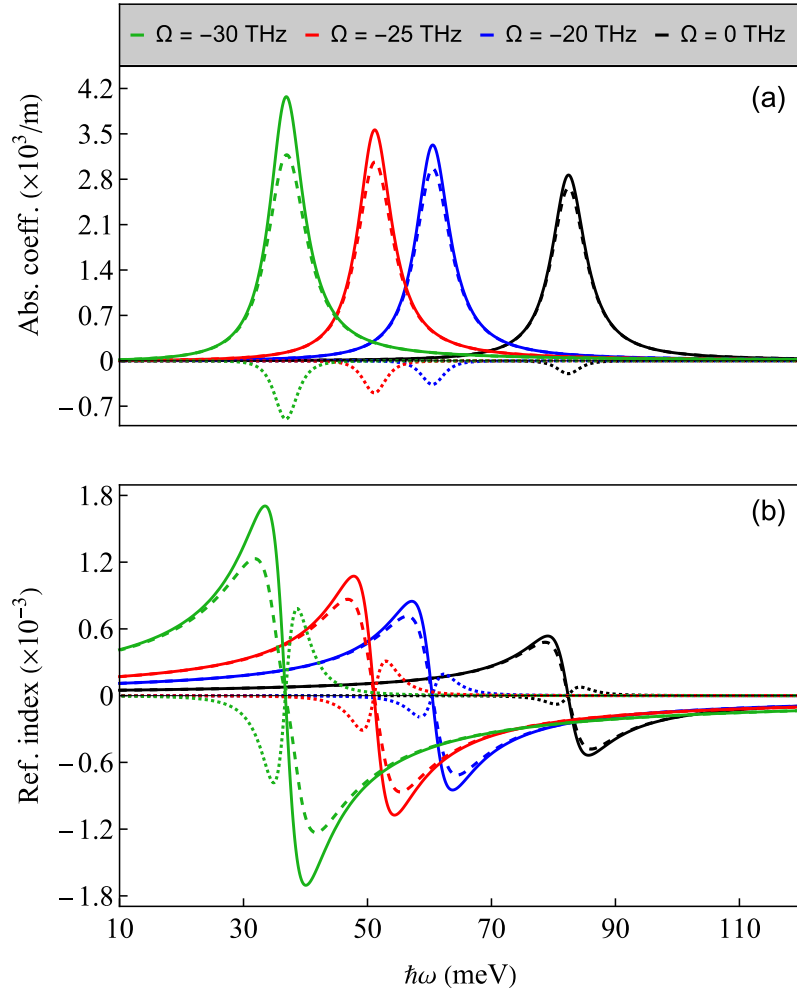


Figura 6.6: Esboço da absorção e índice de refração em função da energia do fóton. Usamos os mesmos parâmetros da Fig. 6.5, mas agora considerando rotações negativas. Em ambas as figuras, usamos $\phi = 0.5 (h/e)$ e $B = 15$ Tesla.

coeficientes de absorção linear, não linear de terceira ordem e total em função da energia do fóton incidente para alguns valores positivos de rotação. Podemos ver que o coeficiente de absorção linear predomina (maior amplitude), enquanto que o coeficiente de absorção não linear de terceira ordem tem uma pequena contribuição. À medida que o parâmetro de rotação Ω aumenta, os picos ressonantes (também conhecidos como frequência de transição) em $\hbar\omega = \Delta E$ mudam para energias mais altas, e as amplitudes de todos os OACs diminuem.

A Fig. 6.5(b) mostra os índices de refração linear, não linear de terceira ordem e o total para alguns valores positivos de rotação. Os RICs exibem o mesmo comportamento em relação aos efeitos de rotação que os OACs, com as posições de pico mudando para energias mais altas e resultando em uma mudança de ressonância azul em um anel quântico bidimensional. As

intensidades de pico de todos os RICs diminuem à medida que Ω aumenta. Notavelmente, os RICs estão localizados no pico de ressonância $\hbar\omega = \Delta E$ dos OACs, como esperado. Além disso, a influência do parâmetro de rotação é evidente nas Figs. 6.5(a)-(b), onde as curvas com efeitos de rotação (coloridas) são separadas das sem efeitos de rotação (pretas).

Na Fig. 6.6, mostramos os perfis dos OACs e dos RICs em função da energia do fóton para a transição entre estados com $(n = 0, m = 0)$ e $(n = 2, m = 1)$. Para este caso, os cálculos são realizados para quatro valores rotação, incluindo rotações negativas, a saber, $\Omega = 0$, $\Omega = -20$ THz, $\Omega = -25$ THz e $\Omega = -30$ THz. A Fig. 6.6 revela uma tendência semelhante à observada na Fig. 6.5. Entretanto, é evidente que, à medida que os parâmetros de rotação diminuem (até se tornarem rotações negativas), os efeitos não lineares se tornam mais pronunciados (veja os coeficientes não lineares de terceira ordem (linha pontilhada) na Fig. 6.6).

Conclusão

Neste trabalho, investigamos diversos aspectos da mecânica quântica em referenciais não inerciais, com um foco particular no efeito Aharonov-Bohm (AB) e suas implicações em diferentes contextos físicos. A tese foi estruturada em seis capítulos, cada um abordando uma parte específica da pesquisa. Nesta seção, faremos uma revisão detalhada dos principais resultados de cada capítulo e discutiremos as perspectivas futuras para a continuação deste trabalho.

No primeiro capítulo, introduzimos os conceitos fundamentais e os objetivos da tese. Apresentamos uma visão geral do efeito AB, destacando sua importância tanto teórica quanto experimental. Discutimos a motivação para estudar sistemas em referenciais não inerciais e os potenciais impactos desses estudos em diversas áreas da física, como a ótica quântica e a optoeletrônica.

O segundo capítulo foi dedicado a uma revisão extensa do efeito Aharonov-Bohm. Abordamos sua história, desde as primeiras propostas teóricas até as confirmações experimentais, e exploramos as interpretações físicas do efeito, com ênfase na fase geométrica adquirida por partículas em presença de potenciais vetoriais. Também discutimos variações do efeito, como o efeito Aharonov-Casher, e suas implicações em diferentes contextos físicos.

No terceiro capítulo, focamos na mecânica quântica de partículas com spin em referenciais não inerciais. Utilizamos a equação de Dirac em um referencial girante e aplicamos a transformação de Foldy-Wouthuysen-Tani para derivar a equação de Pauli-Schrödinger. Este

formalismo permitiu-nos incluir os efeitos de rotação e spin no Hamiltoniano do sistema. Discutimos detalhadamente o termo de acoplamento spin-rotação e seus efeitos sobre o espectro de energia das partículas.

No quarto capítulo, aplicamos os conceitos desenvolvidos anteriormente para estudar o espectro de energia de uma partícula confinada em um potencial de AB em um referencial girante. Utilizamos o método de extensão auto-adjunta para resolver a equação de movimento radial para estados ligados, demonstrando que a inclusão do grau de liberdade do spin resulta na adição de um termo singular no Hamiltoniano, regularizado pelo método de Kay-Studer. Analisamos numericamente os autovalores de energia, mostrando que os estados de spin rotulados por $s = \pm 1$ têm contribuições diferentes para o espectro de energia do problema. Este capítulo revelou novos aspectos físicos do efeito AB quando combinado com a rotação, destacando a quebra de simetria entre os estados de spin. Observamos também que os efeitos da rotação induzem uma dependência não trivial no comportamento das energias dos estados ligados.

No quinto capítulo, revisamos conceitos fundamentais de óptica não linear. Introduzimos o formalismo do tensor de susceptibilidade não linear e a teoria quântica da susceptibilidade óptica. Utilizamos a matriz densidade para calcular as susceptibilidades ópticas não lineares de um sistema de dois níveis interagindo com um campo elétrico intenso. A partir desses cálculos, derivamos os coeficientes de absorção e as mudanças no índice de refração do sistema. Discutimos como esses efeitos não lineares podem ser explorados em diversas aplicações tecnológicas, incluindo comunicações ópticas e processamento de sinais.

No sexto capítulo, estudamos as propriedades ópticas de um anel quântico bidimensional sob o efeito de um potencial de AB em um referencial girante. Calculamos os coeficientes de absorção óptica (OACs) e os índices de refração (RICs) do sistema, analisando numericamente os resultados e mostrando que os efeitos de rotação têm um impacto significativo sobre o comportamento do sistema. Observamos uma mudança para valores mais altos do pico de energia ressonante e uma diminuição na amplitude dos picos com o aumento dos efeitos de rotação. Estes resultados fornecem informações valiosas sobre a interação entre rotação e comportamento quântico em anéis quânticos, com potenciais aplicações em óptica quântica e optoeletrônica. Demonstramos que a rotação pode ser usada como um parâmetro de controle para ajustar as propriedades ópticas do anel, o que pode ser explorado em dispositivos optoeletrônicos avançados.

Os resultados obtidos nesta tese abrem possibilidades para futuras pesquisas. Como por exemplo o estudo de outros sistemas quânticos em referenciais não inerciais, como nanoestruturas, pontos quânticos e poços quânticos em referenciais girantes ou acelerados, o que pode revelar novos fenômenos físicos. Além disso, pode-se investigar como a temperatura e a pressão afetam os estados quânticos em sistemas rotativos pode fornecer uma compreensão mais completa das propriedades desses sistemas.

O propósito deste apêndice é revisar alguns conceitos necessários para estudar o efeito AB da perspectiva da teoria de fibrados principais e associados. Em geral, nos baseamos nas Refs. [156–162]. Ao leitor interessado em se aprofundar, outras referências úteis são [163–176].

A.1 Espaços topológicos

Definição A.1.1. *Seja X um conjunto e $\mathcal{T} = \{U_i | i \in I\}$ uma família de subconjuntos abertos de X . A tupla (X, \mathcal{T}) é um espaço topológico, se:*

(i) $\emptyset, X \in \mathcal{T}$;

(ii) *Se \mathcal{T} é qualquer coleção (finita ou infinita) de I , a família $\{U_j | j \in J\}$ satisfaz $\cup_{j \in J} U_j \in \mathcal{T}$;*

(iii) *Se K é qualquer subcoleção finita de I , a família $\{U_k | k \in K\}$ satisfaz $\cap_{k \in K} U_k \in \mathcal{T}$.*

É comum que apenas X seja chamado de espaço topológico e que a existência de \mathcal{T} fique subentendida. A definição de espaços topológicos é simples, porém bastante abstrata. A fim de torná-la mais clara, vamos aplicá-la a um exemplo simples.

Exemplo A.1.1. Seja $M = \{a, b, c\}$. Então $\mathcal{O} = \{\emptyset, \{a\}, \{b\}, \{a, b\}, \{a, b, c\}\}$ é uma topologia em M já que:

i) $\emptyset \in \mathcal{O}$ e $M \in \mathcal{O}$;

ii) Seja C_i um dos conjuntos em \mathcal{O} . Claramente, $C_i \cup C_j = \{a, b\}, M \in \mathcal{O}$. Por exemplo, $\{a\} \cup \{b\} = \{a, b\} \in \mathcal{O}$, $\{a\} \cup M = M \in \mathcal{O}$, etc.;

iii) Seja $C_i \in \mathcal{O}$. É fácil notar que $C_i \cap C_j = \emptyset, \{a, b\}, M \in \mathcal{O}$.

Definição A.1.2. Seja X um espaço topológico. N é uma vizinhança de $x \in X$ se N contém um conjunto aberto U que contém x :

$$N(x) \supset U(x). \quad (\text{A.1})$$

Exemplo A.1.2. Seja $X = \mathbb{R}$ com a topologia usual¹. O intervalo $[-1, 1]$ é uma vizinhança de um ponto arbitrário $x \in (a, b)$.

Definição A.1.3. Sejam X e Y espaços topológicos. Um mapa $f : X \rightarrow Y$ é contínuo se a imagem inversa de um conjunto aberto em Y é um conjunto aberto em X .

A definição de continuidade pode aparentar não ter nenhuma conexão com as noções de continuidade dos cursos de Cálculo. Mas vamos mostrar, através de um exemplo, que as duas são equivalentes. Seja uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x) = \begin{cases} -x + 1 & \text{se } x \leq 0, \\ -x + \frac{1}{2} & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Tomamos a topologia usual em \mathbb{R} , portanto qualquer intervalo aberto (a, b) é um conjunto aberto. Em cálculo, dizemos que f é descontínua em $x = 0$. Seja o intervalo aberto $(3/2, 2) \cup Y$, o mapa inverso $f^{-1}((3/2, 2) \cup Y) = (-1, -1/2)$ é um intervalo aberto em X . Entretanto, se tomarmos o conjunto aberto $(1 - 1/4, 1 + 4) \cup Y$, temos $f^{-1}((1 - 1/4, 1 + 4) \cup Y) = (-1/4, 0]$, que não é um conjunto aberto na topologia usual.

Definição A.1.4. Um espaço topológico (X, \mathcal{T}) é chamado de espaço de Hausdorff se, para dois pontos distintos x e x' , sempre existem vizinhanças de $U(x)$ de x e $U(x')$ de x' disjuntas:

$$U(x) \cap U(x') = \emptyset. \quad (\text{A.3})$$

¹Seja $X = \mathbb{R}$. Todos os intervalos abertos (a, b) e suas uniões definem uma topologia chamada de *topologia usual*. Essa noção pode ser generalizada para \mathbb{R}^n utilizando produtos cartesianos $(a_1, b_1) \times \cdots \times (a_n, b_n)$.

Exemplo A.1.3. \mathbb{R} com a topologia usual é um espaço Hausdorff.

Os espaços Hausdorff desempenham um papel fundamental nas teorias físicas, proporcionando as bases para a representação matemática de fenômenos naturais. Entre eles, destacam-se as variedades e os fibrados, temas centrais que serão abordados em detalhes nas próximas seções.”

A.2 Variedades diferenciáveis

As variedades diferenciáveis, ou suaves, são espaços topológicos que exibem semelhança local com o conjunto dos números reais de dimensão m , representado por \mathbb{R}^m , mas podem diferir consideravelmente globalmente. Antes de discutirmos formalmente as variedades, é proveitoso considerar um exemplo simples que ilustre esse conceito de forma intuitiva. Esse exemplo é tão apropriado que inspira a nomenclatura de estruturas definidas em variedades.

Podemos usar mapas (ou cartas) para representar porções da superfície da Terra em superfícies planas bidimensionais. Essas cartas são reunidas em um atlas. No entanto, um único mapa não é capaz de representar toda a superfície terrestre, já que esta se assemelha a uma esfera tridimensional. Cada carta possui partes que se conectam com outras cartas de maneira contínua. Assim, ao usar as cartas de um atlas, conseguimos cobrir toda a superfície da Terra

Essa abordagem de utilizar mapas para representar porções da superfície terrestre em superfícies planas bidimensionais, juntamente com o conceito de atlas, proporciona uma maneira intuitiva de compreender a ideia de variedades. Assim como a Terra pode ser representada por meio de uma coleção de mapas que se conectam de maneira contínua, as variedades podem ser descritas como espaços topológicos que podem ser localmente aproximados por \mathbb{R}^m através de mapas, mesmo que globalmente possuam características diferentes. Esta analogia serve como base para uma compreensão inicial das variedades. A seguir, passemos à definição formal destes objetos.

Definição A.2.1. 1. Uma carta em um espaço topológico M é um par (U, ϕ) onde U é um aberto em M e $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ é um homeomorfismo de U em um subconjunto aberto do espaço Euclidiano \mathbb{R}^m munido da topologia usual.

2. Sejam (U_1, ϕ_1) e (U_2, ϕ_2) com $U_1 \cap U_2 \neq \emptyset$. A função de transição entre as duas cartas

é o mapa $\phi_1 \circ \phi_1^{-1}$ do subconjunto aberto $\phi_1(U_1 \cap U_2) \subset \mathbb{R}^m$ para o subconjunto aberto $\phi_2(U_1 \cap U_2) \subset \mathbb{R}^m$.

3. Um atlas em M é uma coleção de cartas $\{(U_i, \phi_i)\}$ tal que

(a) M é coberto pela coleção de cartas, ou seja, $M = \cup_i U_i$;

(b) cada função de transição $\phi_j \circ \phi_i^{-1}$ é um mapa de classe C^∞ de $\phi_i(U_i \cap U_j)$ para $\phi_j(U_i \cap U_j)$ em \mathbb{R}^m .

Um atlas é dito completo se é máximo - ou seja, não está contido em nenhum outro atlas. Para um atlas completo, a coleção $\{U_i, \phi_i\}$ é chamada de estrutura diferencial em M . Diz-se então que o espaço topológico é uma variedade diferenciável (ou suave).

4. Um ponto $p \in U \subset M$, tem coordenadas $(\phi^1(p), \dots, \phi^m(p)) \in \mathbb{R}^m$ com respeito a carta (U, ϕ) , onde as funções coordenadas $\phi^\mu : U \rightarrow \mathbb{R}$, $\mu = 1, 2, \dots, m$, são definidas em termos das funções de projeção $u^\mu : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, como

$$\phi^\mu(p) := u^\mu(\phi(p)). \quad (\text{A.4})$$

Costuma-se representar as funções coordenadas por x^μ , $\mu = 1, 2, \dots, m$, e as coordenadas de um ponto p são escritas como uma m -nupla de números reais $(x^1(p), x^2(p), \dots, x^m(p))$.

O conjunto aberto $U \subset M$ também é chamado de *coordenada local* e as funções coordenadas também são chamadas de *sistemas de coordenadas*. Se U_i e U_j se sobrepõem, são atribuídos dois sistemas de coordenadas para um ponto $p \in U_i \cap U_j$. Portanto, a condição (b) garante que a transição de um sistema de coordenadas para outro seja *suave* (infinitamente diferenciável, C^∞). O mapa ϕ_i atribui m coordenadas x^μ a um ponto $p \in \mathbb{R}^m$, enquanto ϕ_j designa m coordenadas y^ν , $\nu = 1, \dots, m$, ao mesmo ponto. Representamos as funções de transição $\phi_j \circ \phi_i^{-1}$ pelas *funções de transformação de coordenadas* $x^\mu = x^\mu(y)$. Assim, definimos em uma variedade o conceito de diferenciabilidade já conhecido do cálculo: A transformação de coordenadas é diferenciável se cada função $x^\mu(y)$ é diferenciável com respeito a cada um dos y^ν .

Exemplo A.2.1. O exemplo mais trivial de variedade é o espaço Euclidiano \mathbb{R}^m , em que podemos cobrir todo o espaço com uma única carta (\mathbb{R}^m, ϕ) e o homeomorfismo ϕ pode ser a identidade, $id : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Exemplo A.2.2. *Uma esfera n -dimensional é um exemplo de variedade. Para mostrar na prática o uso das definições de variedades apresentadas, utilizamos como exemplo o caso $n = 1$ (o círculo de raio unitário):*

$$S^1 = \{(x_1^2, x_2^2) \in \mathbb{R}^2 \mid x_1^2 + x_2^2 = 1\}. \quad (\text{A.5})$$

Precisamos de pelo menos duas cartas. Definimos então (U_1, φ_1) com $U_1 = S^1 \setminus (1, 0)$ e o mapa inverso dado por

$$\varphi_1^{-1} : (0, 2\pi) \rightarrow S^1 \quad (\text{A.6})$$

$$\varphi_1^{-1} : \theta \mapsto (\cos(\theta), \sin(\theta)) \quad (\text{A.7})$$

e (U_2, φ_2) com U_2 em $U_2 = S^1 \setminus (-1, 0)$ e o mapa inverso dado por

$$\varphi_2^{-1} : (-\pi, \pi) \rightarrow S^1 \quad (\text{A.8})$$

$$\varphi_2^{-1} : \theta \mapsto (\cos(\theta), \sin(\theta)). \quad (\text{A.9})$$

Os mapas φ_1^{-1} e φ_2^{-1} admitem inverso. Todos os mapas φ_1 , φ_2 , φ_1^{-1} e φ_2^{-1} são contínuos, logo φ_1 e φ_2 representam homeomorfismos e os mapas de sobreposição $\varphi_1 \circ \varphi_2^{-1}$, $\varphi_2 \circ \varphi_1^{-1} \in C^\infty$ são suaves. Portanto todas as condições de uma variedade são satisfeitas.

Exemplo A.2.3. *O cone, isto é, o conjunto*

$$C = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 = 0\}, \quad (\text{A.10})$$

não é uma variedade porque a origem não tem uma vizinhança homeomórfica a \mathbb{R}^2 . Porém, se tomarmos $x \geq 0$ (meio cone), teremos uma variedade.

Definição A.2.2. *Seja M uma variedade m -dimensional com um atlas (U_i, ϕ_i) e N uma variedade n -dimensional munida de um atlas (V_j, ψ_j) . Uma variedade produto $M \times N$ é uma variedade $m + n$ -dimensional cujo atlas é dado por $\{(U_i \times V_j), (\phi_i, \psi_j)\}$. Um ponto em $M \times N$ é dado por (p, q) , onde $p \in M$ e $q \in N$, e a imagem da função coordenada (ϕ_i, ψ_j) atuando em (p, q) é a coordenada $(\phi_i(p), \psi_j(q)) \in \mathbb{R}^{m+n}$.*

Exemplo A.2.4. *O toro bidimensional T^2 é uma variedade produto de dois círculos, $T^2 = S^1 \times S^1$, com as coordenadas (θ_1, θ_2) e $\theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi)$.*

Definição A.2.3. *Sejam M e N variedades diferenciáveis e $f : M \rightarrow N$ uma mapa contínuo. Um ponto $p \in M$ é mapeado em um ponto $f(p) \in N$. Sejam as cartas $(U, \phi) \in M$ e $(V, \psi) \in N$, em que $p \in U$ e $f(p) \in V$. Dizemos que f é diferenciável em p ou em $\phi(p)$ se o mapa*

$$\psi \circ f \circ \phi^{-1} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (\text{A.11})$$

é infinitamente diferenciável (C^∞). Mapas diferenciáveis também são chamados de suaves

Esta definição é independente do sistema de coordenadas. Ou seja, se $\psi \circ f \circ \phi^{-1}$ é diferenciável em p com respeito as cartas (U, ϕ) em que $p \in U$ e (V, ψ) em que $f(p) \in V$, então $\tilde{\psi} \circ f \circ \tilde{\phi}^{-1}$ também será diferenciável com respeito as cartas $(\tilde{U}, \tilde{\phi})$ em que $p \in \tilde{U}$ e $(\tilde{V}, \tilde{\psi})$ em que $\tilde{f}(p) \in \tilde{V}$. A propriedade de um mapa ser diferenciável em um ponto é independente da escolha de cartas porque escolhemos atlas C^∞ -diferenciáveis em que as mudanças de coordenadas são C^∞ -diferenciáveis.

Definição A.2.4. *Seja o mapa $f : M \rightarrow N$ um homeomorfismo. Se ambos f e f^{-1} são diferenciáveis, então f é um difeomorfismo.*

Diz-se que M é difeomorfo a N e vice-versa, representado por $M \equiv N$. Difeomorfismos formam uma classe de equivalência. Assim como homeomorfismos classificam espaços de acordo com a possibilidade de deformar um espaço no outro continuamente, difeomorfismos classificam espaços de acordo com a possibilidade de de deformar um espaço no outro suavemente.

Antes de encerramos esta seção, vamos apresentar dois tipos de mapas definidos em variedades que serão necessários para outras definições nas seções subsequentes.

Definição A.2.5. *Uma curva em uma variedade m -dimensional é um mapa $c : I \rightarrow M$, onde I é um intervalo aberto $I \subset \mathbb{R}$. Em uma carta (U, ϕ) as coordenadas da curva $c(t)$ podem são dadas por $x = \phi \circ c : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$.*

Definição A.2.6. *Uma função em uma variedade M é um mapa suave $f : M \rightarrow \mathbb{R}$. Em um sistema de coordenadas (U, ϕ) , as coordenadas de f são dadas por $f \circ \phi^{-1} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$.*

O conjunto de funções suaves em M é representado por $C^\infty(M)$.

A.2.1 Vetores tangentes, formas e tensores

Definição A.2.7. *Duas curvas c_1 e c_2 são tangentes em um ponto p em M se*

(i) $c_1(0) = c_2(0) = p$ e

(ii)

$$\left. \frac{d\phi(c_1(t))}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{d\phi(c_2(t))}{dt} \right|_{t=0}$$

Esta definição independe de um sistema de coordenadas. Curvas tangentes em um ponto são equivalentes $c_1 \sim c_2$. O conjunto de todas as curvas tangentes em um ponto define uma classe de equivalência, cujo representante é dado por $[c_1]$.

Definição A.2.8. *espaço tangente $T_p M$ a M em um ponto $p \in M$ é o conjunto de todos os vetores tangentes ao ponto p .*

Teorema A.2.1. *Um espaço tangente tem a estrutura de um espaço vetorial real.*

A prova deste teorema está disponível em [159, 161]. Sua importância reside na definição da adição e da multiplicação por um escalar de classes de curvas.

Uma outra definição mais conhecida, e operacionalmente mais útil, é dada em termos da derivada direcional de uma função ao longo da curva.

Definição A.2.9. *Definimos o vetor tangente em $c(0)$ como a derivada direcional de uma função $f(c(t))$ ao longo de uma curva $c(t)$ em $t = 0$. A taxa de variação de $f(c(t))$ em $t = 0$ ao longo da curva é dada por*

$$\left. \frac{df(c(t))}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{dx^i(c(t))}{dt} \frac{\partial f}{\partial x^i} \right|_{t=0}, \quad (\text{A.12})$$

Em termos da coordenada local, temos

$$\left. \frac{dx^i(c(t))}{dt} \frac{\partial f}{\partial x^i} \right|_{t=0}. \quad (\text{A.13})$$

onde $x^i(c(t)) = \phi(c(t))$ são as curvas em coordenadas locais, e usamos a notação abreviada

$$\frac{\partial f}{\partial x^i} \equiv \frac{\partial f \circ \phi^{-1}}{\partial x^i}. \quad (\text{A.14})$$

Dito de outra maneira, $\frac{df(c(t))}{dt}$ é obtido pela atuação na função f do operador diferencial

$$v = v^i \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right), \quad (\text{A.15})$$

onde

$$v^i = \left. \frac{dx^i(c(t))}{dt} \right|_{t=0}, \quad (\text{A.16})$$

tal que

$$\left. \frac{df(c(t))}{dt} \right|_{t=0} \equiv v[f]. \quad (\text{A.17})$$

O operador v define um vetor tangente a M em $p = c(0)$ ao longo da direção da curva $c(t)$. Assim, podemos identificar a classe de equivalência $[c]$ com os vetores tangentes v .

O conjunto de todos os vetores tangentes em p define um espaço tangente T_pM . O espaço tangente é um espaço vetorial real em que $\dim T_pM = \dim M$. O espaço tangente pode ser expandido de forma natural na base

$$\{e_i\} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x^i} \right\}, \quad (\text{A.18})$$

chamada de *base coordenada*. Esta definição motiva uma outra utilizando o conceito de *derivação*, em que as classes de curvas $[c] = v \in T_pM$ podem ser pensadas como um operador diferencial atuando no espaço $C^\infty(M)$ das funções diferenciáveis em M .

Definição A.2.10.

1. Uma derivação em um ponto $p \in M$ é um mapa $v : C^\infty(M) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$(i) \quad v(f + g) = v(f) + v(g) \text{ para todo } f, g \in C^\infty(M),$$

$$v(\lambda f) = \lambda v(f) \text{ para todo } f \in C^\infty(M) \text{ e } \lambda \in \mathbb{R}.$$

$$(ii) \quad v(fg) = f(p)v(g) + g(p)v(f) \text{ para todo } f, g \in C^\infty(M).$$

2. O conjunto de todas as derivações em $p \in M$ é representado por D_pM .

O termo “derivação” vem da analogia com a regra de Leibniz do cálculo usual. É muito mais fácil e natural reconhecer a estrutura de um espaço vetorial real em D_pM . Na verdade, existe um teorema que estabelece que um mapa linear entre T_pM e D_pM é um isomorfismo. A prova desse teorema pode ser encontrada nas Refs. [159, 161].

A.2.2 Vetores cotangentes

Já que T_pM é um espaço vetorial, então deve existir um espaço vetorial dual a T_pM , cujos elementos são funções lineares de T_pM para \mathbb{R} . Um vetor dual $\omega : T_pM \rightarrow \mathbb{R}$ é chamado *vetor*

cotangente ou, no contexto de formas diferenciais, *1-forma* ou *uniforma*. O conjunto de vetores cotangentes em um ponto p é chamado de *espaço cotangente*, e é denotado por T_p^*M . Seja e_μ a base coordenada de T_pM , a base dual é denotada por dx^μ . Por definição, o produto interno $\langle, \rangle : T_p^*M \times T_pM \rightarrow \mathbb{R}$, satisfaz

$$\langle dx^\mu, \frac{\partial}{\partial x^\nu} \rangle = \delta_\nu^\mu. \quad (\text{A.19})$$

Um vetor expandido na base coordenada é dado por $v^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}$, e o vetor cotangente expandido na base dual é dado por $\omega = \omega_\nu dx^\nu$. Temos então

$$\langle \omega, v \rangle = \omega_\nu v^\mu \langle dx^\mu, \frac{\partial}{\partial x^\nu} \rangle = \omega_\mu v^\mu. \quad (\text{A.20})$$

Um exemplo simples de vetor cotangente é a derivada df de uma função $f \in C^\infty(M)$ definida como

$$df : v \rightarrow df(v) = \langle df, v \rangle \equiv v(f) = v^\mu \frac{\partial f}{\partial x^\mu} \quad (\text{A.21})$$

para todo $v \in T_pM$. Comparando com a equação (A.20), podemos constatar que as componentes de df são $\frac{\partial f}{\partial x^\mu}$, de forma que

$$df = \frac{\partial f}{\partial x^\mu} dx^\mu. \quad (\text{A.22})$$

Interessante observar como esta notação lembra o gradiente de uma função (de fato, o familiar operador gradiente do cálculo vetorial pode ser associado com a ação da derivada exterior d em uma 0-forma no contexto de formas diferenciais, que discutiremos mais adiante).

A.2.3 Tensores

Um *tensor* do tipo (q, r) é um mapa multilinear de um produto de espaços vetoriais e espaços vetoriais duais para os números reais. Se o espaço vetorial considerado for o espaço vetorial tangente T_pM com espaço vetorial dual T_p^*M , um tensor do tipo (q, r) em p é o mapa multilinear

$$T : \overbrace{T_p^*M \times \cdots \times T_p^*M}^q \times \overbrace{T_pM \times \cdots \times T_pM}^r \rightarrow \mathbb{R}. \quad (\text{A.23})$$

O espaço vetorial de tensores do tipo (q, r) em um ponto p é denotado por $T_{r,p}^q$. Podemos expandir um tensor em termos das bases coordenadas, a saber:

$$T = T^{\mu_1 \cdots \mu_q}_{\nu_1 \cdots \nu_r} \frac{\partial}{\partial x^{\mu_1}} \otimes \cdots \otimes \frac{\partial}{\partial x^{\mu_q}} dx^{\mu_1} \otimes \cdots \otimes dx^{\mu_r}. \quad (\text{A.24})$$

A ação de T em r vetores e q duais resulta no número

$$T(\omega_1 \cdots \omega_q; v_1 \cdots v_r) = T^{\mu_1 \cdots \mu_q}_{\nu_1 \cdots \nu_r} \omega_{1\mu_1} \cdots \omega_{q\mu_q} v_1^{\nu_1} \cdots v_r^{\nu_r}. \quad (\text{A.25})$$

A.2.4 Campos vetoriais e tensoriais

As definições de vetores tangentes que apresentamos estão restritas a um ponto na variedade. Vamos generalizar essas noções para toda a variedade usando o conceito de “campo”.

Definição A.2.11.

1. Um campo vetorial em uma variedade é uma associação suave de um vetor tangente $X \in T_p M$ em cada ponto p em M , onde o termo “suave” significa que, para toda função $f \in C^\infty$, a função $Xf : M \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$M \rightarrow \mathbb{R} \tag{A.26}$$

$$p \mapsto (Xf)(p) := X_p(f) \tag{A.27}$$

é infinitamente diferenciável.

2. Um campo vetorial em um subconjunto aberto U de M é definido da mesma maneira, exceto que a condição da equação (A.26) deve ser verdadeira para toda $f \in C^\infty(U)$ e pontos p no subconjunto $U \subset M$. Outra definição equivalente é a seguinte:
3. Sejam $f, g \in C^\infty(M)$. Um campo vetorial X em M é um mapa $X : C^\infty(M) \rightarrow C^\infty(M)$ que satisfaz a regra de Leibniz

$$X(fg) = gX(f) + fX(g). \tag{A.28}$$

4. O conjunto de todos os vetores em uma variedade, representado por $\mathfrak{X}(M)$, é munido naturalmente com a estrutura de um espaço vetorial real.

De maneira análoga, podemos definir um *campo tensorial* do tipo (q, r) em uma variedade como uma associação suave de um tensor $\mathcal{T}_{r,p}^q(M)$ em cada ponto p da variedade. O conjunto de campos tensoriais do tipo (q, r) em M é denotado por $\mathcal{T}_r^q(M)$. Casos especiais de campos tensoriais incluem o de funções suaves, $\mathcal{T}_0^0(M) = C^\infty(M)$, o conjunto de todos os campos vetoriais $\mathcal{T}_0^1(M) = \mathfrak{X}(M)$, e $\mathcal{T}_1^0(M) = \Omega^1(M)$, o conjunto de todos os campos vetoriais duais.

A.2.5 Mapa diferencial entre variedades. Pullback e Pushforward

Definição A.2.12. Sejam M e N variedades diferenciáveis. Um mapa suave $f : M \rightarrow N$ induz naturalmente uma aplicação $f_* : T_p M \rightarrow T_{f(p)} N$ entre os espaços tangentes de M e N . O mapa f_* é denominado de *mapa diferencial* ou *pushforward*.

Se $g \in N$, ou seja, $g : N \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função diferenciável, e $v \in T_p M$, então

$$(f_*v)[g] = v[g \circ f]. \quad (\text{A.29})$$

Em outras palavras, se v é um vetor tangente a curva $c(t)$, tal que $v[g \circ f]$ caracteriza a taxa de variação de uma função $g \circ f$ ao longo da curva $c(t)$, então f_*v caracteriza a taxa de variação de uma função g ao longo da curva imagem $f(c(t))$. Em termos das cartas locais (U, ϕ) em M e (V, ψ) em N , as componentes da diferencial do mapa, é dado por

$$(f_*v)^\nu = v^\mu \frac{\partial y^\nu}{\partial x^\mu}, \quad (\text{A.30})$$

onde $x = \phi(p)$ e $y = \psi(f(p))$. Observe que as componentes v^μ e $(f_*v)^\nu$ são relacionadas pelo Jacobiano de f . Obviamente, o termo “pushforward” (“empurrar pra frente”, em inglês) está relacionado ao fato de que f_* transporta (empurra) vetores tangentes em M para vetores tangentes em N . Neste trabalho, por questão de simplicidade, usaremos pushforward para nos referirmos ao mapa diferenciável f_* .

Definição A.2.13. *Um mapa $f : M \rightarrow N$ induz um mapa diferenciável $f^* : T_{f(p)}^* M \rightarrow T_p^* N$ que leva uma forma ω em N chamada também de pullback, definido por*

$$(f^*\omega, v) = (\omega, f_*v) \quad (\text{A.31})$$

onde $v \in T_p M$ e $\omega \in T_{f(p)}^* N$.

Usando coordenadas locais (U, ϕ) em M e (V, ψ) em N para expandir $\omega = \omega_\nu dy^\nu$, obtemos uma lei de transformação para as componentes de $f^*\omega$, a saber,

$$(f^*\omega)_\mu = \omega_\nu \frac{\partial y^\nu}{\partial x^\mu}, \quad (\text{A.32})$$

em que $x = \phi(p)$ e $y = \psi(f(p))$.

Enquanto que, como dissemos anteriormente, f_* “empurra” vetores tangentes na mesma direção de f , o mapa f^* “puxa” formas na direção contrária a f . Isto explica a origem do termo pullback (“puxar pra trás”, em inglês). Por uma questão de simplicidade, iremos utilizá-lo para nos referir a f_* quando for necessário.

A.2.6 Fluxo induzido por um campo vetorial

Definição A.2.14. *Seja X um campo vetorial em M . Uma curva integral $x(t)$ é uma curva em M cujo vetor tangente em $x(t)$ é $X|_{x(t)}$.*

Em uma carta local (U, ϕ) , esta definição leva ao conjunto de equações diferenciais de primeira ordem

$$\frac{dx^\mu}{dt} = X^\mu(x(t)), \quad (\text{A.33})$$

em que x^μ é a μ -ésima componente de $\phi(x(t))$ e $X = X^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}$.

O teorema da existência e unicidade das soluções para uma equação diferencial ordinária garante que (A.33) tem uma solução unívoca, pelo menos localmente em uma vizinhança de $t = 0$, uma vez especificada a condição inicial $x^\mu(t = 0) = x_0^\mu$. Seja $\sigma(t, x^0)$ uma curva integral de X que passa por um ponto x_0 em $t = 0$. Representamos as coordenadas locais desta curva integral por $\sigma^\mu(t, x^0)$. A equação (A.33) então fica

$$\frac{d}{dt}\sigma^\mu(t, x_0) = X^\mu(x(t)), \quad (\text{A.34})$$

e a condição inicial é escrita como

$$\sigma^\mu(0, x_0) = x_0^\mu. \quad (\text{A.35})$$

Definição A.2.15. *O mapa $\sigma : \mathbb{R} \times M \rightarrow M$ é chamado de fluxo induzido por um campo vetorial $X \in \mathfrak{X}(M)$.*

Um fluxo satisfaz a propriedade

$$\sigma(t, \sigma(s, x_0)) = \sigma(t + s, x_0) \quad (\text{A.36})$$

para qualquer $s, t \in \mathbb{R}$. Esta propriedade decorre da unicidade das soluções de equações diferenciais ordinárias. Quando fixamos o parâmetro $t \in \mathbb{R}$, o fluxo se torna um difeomorfismo de M para M , representado por $\sigma(t, x_0) \equiv \sigma_t(x) : M \rightarrow M$. A família de difeomorfismos $\{\sigma_t | t \in \mathbb{R}\}$ é um grupo abeliano, que satisfaz os axiomas de grupo

- (i) $\sigma_t(\sigma_s(x)) = \sigma_{t+s}(x)$, ou, $\sigma_t \circ \sigma_s = \sigma_{t+s}$;
- (ii) $\sigma_{-t} = (\sigma_t)^{-1}$ e
- (iii) $\sigma_0 = id_M$.

Esse grupo é denominado de *grupo uniparamétrico de transformações*. Por outro lado, também é possível obter o campo vetorial X a partir do grupo uniparamétrico. Se $t = \epsilon$ é infinitesimal, σ_ϵ mapeia um ponto x de coordenadas x^μ em

$$\sigma_\epsilon^\mu(x) = \sigma^\mu(\epsilon, x) = x^\mu + \epsilon X^\mu(x). \quad (\text{A.37})$$

Na equação acima, fizemos uma expansão em série e depois utilizamos as equações (A.34) e (A.35). O campo vetorial X é chamado de *gerador infinitesimal* da transformação σ_t .

Em virtude das propriedades ((i)), ((ii)) e ((iii)) e o fato do fluxo ser a solução da equação (A.34) o fluxo X também é denominado *exponenciação* de X , e é denotado por

$$\sigma^\mu(t, x) = \exp(tX)x^\mu. \quad (\text{A.38})$$

A notação também se justifica pelo seguinte. Façamos uma expansão em série de Taylor de $\sigma_t^\mu(x)$ em torno de $t = 0$:

$$\begin{aligned} \sigma_t^\mu(x) &= x^\mu + t \frac{d}{ds} \sigma^\mu(s, x) \Big|_{s=0} + \frac{1}{2!} t^2 \left(\frac{d}{ds} \right)^2 \sigma^\mu(s, x) \Big|_{s=0} + \dots \\ &= \left[1 + t \frac{d}{ds} + \frac{1}{2!} t^2 \frac{d^2}{ds^2} + \dots \right] \sigma^\mu(s, x) \Big|_{s=0} \\ &\equiv \exp \left(t \frac{d}{ds} \right) \sigma^\mu(s, x) \Big|_{s=0}. \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

A última expressão é apenas uma notação abreviada para a série de Taylor, que também pode ser como $\sigma^\mu(t, x) = \exp(tX)x^\mu$, assim como em A.38. O fluxo satisfaz as seguintes propriedades que são características das exponenciais:

(i)

$$\sigma(0, x) = x = \exp\{(0X)\}x, \quad (\text{A.40})$$

(ii)

$$\frac{d\sigma(t, x)}{dt} = X \exp(tX)x = \frac{d}{dt}[\exp(tX)x], \quad (\text{A.41})$$

(iii)

$$\begin{aligned} \sigma(t, \sigma(s, x)) &= \sigma(t, \exp(sX)x) = \exp\{(tX)\} \exp\{(sX)\}x \\ &= \exp\{[(t+s)X]\}x = \sigma(t+s, x). \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

A.2.7 Derivadas de Lie

Sejam X e Y dois campos vetoriais em uma variedade M . Estamos interessados em saber como Y varia ao longo do fluxo $\sigma(t, x)$ induzido pelo campo vetorial X . Então temos de

comparar o vetor Y no ponto x com o vetor Y num ponto próximo $x' = \sigma_\epsilon(x)$. Todavia, não podemos simplesmente subtrair de Y em dois pontos já que eles geralmente pertencem a espaços vetoriais diferentes. Portanto, precisamos mapear o vetor em $\sigma_\epsilon(x)$ para o ponto x , preservando sua orientação. Para isso, usamos o pushforward associado ao inverso do fluxo, $(\sigma_{-t})_* : T_{(\sigma_t(x))}M \rightarrow T_x M$.

Definição A.2.16. *A derivada de Lie de um campo vetorial Y ao longo de um fluxo induzido por campo vetorial X é definida por*

$$\mathcal{L}_X Y = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [(\sigma_{-\epsilon})_* Y|_{\sigma_\epsilon(x)} - Y|_x]. \quad (\text{A.43})$$

Definições equivalentes são:

$$\mathcal{L}_X Y = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [Y|_x - (\sigma_\epsilon)_* Y|_{\sigma_{-\epsilon}(x)}] \quad (\text{A.44})$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [Y|_{\sigma_\epsilon(x)} - (\sigma_\epsilon)_* Y|_{\sigma_{-\epsilon}(x)}]. \quad (\text{A.45})$$

Em termos da carta local (U, ϕ) , a coordenada é dada por x e os vetores podem ser expandidos como $X = X^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ e $Y = Y^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ é derivada de Lie é dada por

$$\mathcal{L}_X Y = \left(X^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} Y^\nu - Y^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} X^\nu \right) \frac{\partial}{\partial x^\nu}. \quad (\text{A.46})$$

Poderíamos nos perguntar como, dados dois campos vetoriais X e Y , é possível obter um novo campo vetorial? Observe que os produtos XY e YX não são campos vetoriais, já que eles são derivadas de segunda ordem. Para responder à nossa pergunta, precisamos definir um novo conceito. O *colchete de Lie* ou *comutador* é definido por

$$[X, Y]f = X[Y[f]] - Y[X[f]], \quad (\text{A.47})$$

em que $f \in C^\infty(M)$. Em termos de coordenadas locais, o comutador é dado por

$$[X, Y]f = \left(X^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} Y^\nu - Y^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} X^\nu \right) \frac{\partial f}{\partial x^\nu}. \quad (\text{A.48})$$

Então, comparando (A.46) e (A.47), podemos concluir que a derivada de Lie do campo vetorial Y ao longo de X é igual ao colchete de Lie de X e Y ,

$$\mathcal{L}_X Y = [X, Y]f. \quad (\text{A.49})$$

De forma análoga, podemos obter a derivada de Lie para 1-formas. Seja $\omega \in \Omega^1(M)$ um campo vetorial cotangente. Definimos uma derivada de Lie ao de X da mesma maneira que para

vetores, porém agora utilizamos o pullback $(\sigma_\epsilon)^*$ para comparar 1-formas em pontos vizinhos x e $x' = \sigma_\epsilon(x)$.

Definição A.2.17. *Definimos a derivada de Lie de uma 1-forma ω ao longo do fluxo induzido pelo campo vetorial X como*

$$\mathcal{L}_X \omega \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [((\sigma_\epsilon)^* \omega|_{\sigma_\epsilon(x)} - \omega|_x)]. \quad (\text{A.50})$$

Com relação a um dado sistema de coordenadas, temos $\omega = \omega_\mu dx^\mu$. Podemos então encontrar as componentes da derivada de Lie de uma 1-forma, a saber

$$\mathcal{L}_X \omega = \left(X^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \omega_\mu - \frac{\partial}{\partial x^\mu} X^\nu \omega_\nu \right) dx^\mu. \quad (\text{A.51})$$

A derivada de Lie de uma função $f \in C^\infty(M)$ ao longo de um fluxo σ_s induzido por um campo vetorial X é dada por

$$\mathcal{L}_X f \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [f(\sigma_\epsilon(x)) - f(x)] \quad (\text{A.52})$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [f(x^\mu + \epsilon X^\mu(x)) - f(x^\mu)] \quad (\text{A.53})$$

$$= X^\mu(x) \frac{\partial f}{\partial x^\mu} = X[f], \quad (\text{A.54})$$

que é a derivada direcional de f ao longo de X .

A.2.8 Formas diferenciais

Definição A.2.18. *Uma forma diferencial ou exterior de ordem p (ou p -forma) é um tensor alternado ou antissimétrico do tipo $(0, p)$:*

$$\sigma \in S_k : \omega(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(k)}) = \text{sgn}(\sigma) \omega(X_1, \dots, X_k), \quad (\text{A.55})$$

onde $\text{sgn}(\sigma)$ é a função sinal da permutação σ :

$$\text{sgn}(\sigma) = \begin{cases} +1 & \text{para uma permutação par,} \\ -1 & \text{para uma permutação ímpar.} \end{cases} \quad (\text{A.56})$$

O conjunto de todas p -formas em M é representado por $\Omega^p(M)$.

Em geral, o produto tensorial de duas formas diferenciais não é uma forma diferencial.

Definição A.2.19. *Seja ω uma p -forma e α uma q -forma. O produto cunha ou produto exterior $\omega \wedge \alpha$ é uma $p + q$ -forma definida por*

$$(\omega \wedge \alpha)(X_1, \dots, X_{p+q}) = \frac{1}{p!q!} \sum_{\sigma \in S_{p+q}} \text{sgn}(\sigma) \omega(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(p)}) \alpha(X_{\sigma(p+1)}, \dots, X_{\sigma(p+q)}). \quad (\text{A.57})$$

Se (U, ϕ) é uma carta em M , então uma p -forma ω pode ser decomposta em termos das suas componentes

$$\omega = \omega_{\mu_1 \dots \mu_p} dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_p}, \quad (\text{A.58})$$

em que $\omega_{\mu_1 \dots \mu_p}$ são funções suaves e o produto exterior de bases duais

$$dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_p} = \sum_{\sigma \in S_p} \text{sgn}(\sigma) dx^{\mu_{\sigma(1)}} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_{\sigma(p)}} \quad (\text{A.59})$$

forma uma base do espaço vetorial de p -formas $\Omega^p(U)$.

Definição A.2.20. *Seja ω uma p -forma. A derivada exterior d é um mapa $d : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{p+1}(M)$ definido por*

$$\begin{aligned} d\omega(X_1, \dots, X_{p+1}) &= \sum_{i=1}^{p+1} X_i(\omega(X_1, \dots, \hat{X}_i, \dots, X_{p+1})) \\ &\quad + \sum_{i < j} (-1)^{i+j} \omega([X_i, X_j], X_1, \dots, \hat{X}_i, \dots, \hat{X}_j, \dots, X_{p+1}). \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

onde X_i são campos vetoriais em M e o símbolo $\hat{}$ representa a omissão do campo X em particular.

Exemplo A.2.5. *No caso $p = 1$ a forma $\Omega^2(M)$ é dada por*

$$d\omega(X, Y) = X(\omega(Y)) - Y(\omega(X)) - \omega[X, Y]. \quad (\text{A.61})$$

Outra definição bastante útil é feita em termos das componentes em um sistema de coordenadas.

Definição A.2.21. *Em uma carta (U, ϕ) a derivada exterior é definida por*

$$d\omega = \left(\frac{\partial}{\partial x^\nu} \omega_{\mu_1 \dots \mu_p} \right) dx^\nu \wedge dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_p}, \quad (\text{A.62})$$

ou de forma abreviada,

$$d = \frac{\partial}{\partial x^\nu} dx^\nu, \quad (\text{A.63})$$

sem esquecer que a derivada parcial atua nas componentes da p -forma ω . A derivada exterior satisfaz a propriedade

$$d^2 = 0, \quad (\text{A.64})$$

ou seja, d é *nilpotente*. Esta propriedade pode ser demonstrada facilmente utilizando diretamente a definição (A.62). Temos assim

$$d^2\omega = d(d\omega) = \left(\frac{\partial}{\partial x^\sigma} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \omega_{\mu_1 \dots \mu_p} \right) dx^\sigma \wedge dx^\nu \wedge dx^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dx^{\mu_p}. \quad (\text{A.65})$$

A expressão acima é nula, pois $\partial \partial x^\sigma \frac{\partial}{\partial x^\nu} \omega_{\mu_1 \dots \mu_p}$ é simétrico com relação a σ e ν enquanto que $dx^\sigma \wedge dx^\nu$ é antissimétrico.

A.2.9 Grupos e álgebra de Lie

Definição A.2.22. *Um grupo de Lie é uma variedade diferenciável munida de uma estrutura de grupo de modo que as operações de grupo*

1. $\mu : G \times G \rightarrow G, (g_1, g_2) \mapsto g_1 \cdot g_2,$

2. $\iota : G \rightarrow G, g \mapsto g^{-1}.$

são diferenciáveis.

O elemento identidade é representado por e . A dimensão do grupo de Lie G é definida como a dimensão de G como uma variedade.

Exemplo A.2.6. *O conjunto \mathbb{R} é um grupo de Lie com respeito a operação de adição. Este grupo é um grupo abeliano ou comutativo, já que a operação de adição é comutativa. Este também é chamado de grupo de translações unidimensional.*

Exemplo A.2.7. *O círculo unitário no plano complexo,*

$$S^1 = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\} \quad (\text{A.66})$$

munido com multiplicação usual de números complexos é um grupo de Lie abeliano representado por $U(1)$.

Os grupos de maior interesse para aplicações em física são os subgrupos dos grupos lineares gerais $GL(n, \mathbb{R})$ e $GL(n, \mathbb{C})$. O conjunto $GL(n, \mathbb{R}) = \{M : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \mid \det M \neq 0\}$ é o

conjunto de todas as matrizes reais $n \times n$ M que possuem uma inversa. Este conjunto é um subconjunto da variedade \mathbb{R}^{2n} e, portanto, também é uma variedade. Analogamente, o conjunto $GL(n, \mathbb{C}) = \{M : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid \det M \neq 0\}$, com matrizes complexas M $n \times n$, é um subconjunto da variedade \mathbb{R}^{2n^2} e, portanto, também é uma variedade.

O teorema a seguir, cuja prova vamos omitir, é de grande importância pois garante que subgrupos de $(GL(n, \mathbb{R}))$ e $(GL(n, \mathbb{C}))$ também são grupos de Lie. Alguns exemplos importantes de subgrupos de $(GL(n, \mathbb{R}))$ são o *grupo ortogonal*

$$O(n) = \{M \in GL(n, \mathbb{C}) \mid MM^\dagger = M^t M = I_n\}, \quad (\text{A.67})$$

onde t representa a matriz transposta e I_n é a identidade; o grupo *grupo linear especial*;

$$SL(n, \mathbb{R}) = \{M \in GL(n, \mathbb{R}) \mid \det M = 1\} \quad (\text{A.68})$$

e o *grupo de Lorentz*

$$O(1, 3) = \{M \in GL(n, \mathbb{R}) \mid M\eta M^T = \eta\}, \quad (\text{A.69})$$

em que η é a métrica de Minkowski $\eta = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$. Alguns exemplos de subgrupos de $(GL(n, \mathbb{C}))$ relevantes são o *grupo unitário*

$$U(n) = \{M \in GL(n, \mathbb{C}) \mid MM^\dagger = M^\dagger M = 1\}, \quad (\text{A.70})$$

onde \dagger é o conjugado transposto e 1 é a identidade e o grupo *grupo linear especial*;

$$SL(n, \mathbb{C}) = \{M \in GL(n, \mathbb{C}) \mid \det M = 1\}. \quad (\text{A.71})$$

A.2.10 Álgebra de Lie

Definição A.2.23. *Sejam g e h elementos de um grupo de Lie G . Definimos os difeomorfismos translação a direita $R_g : G \rightarrow G$ e Translação a esquerda $L_g : G \rightarrow G$ de h por g por*

$$R_g h = hg \quad e \quad (\text{A.72})$$

$$L_g h = gh \quad (\text{A.73})$$

Já que R_g e L_g são difeomorfismos, eles naturalmente induzem os mapas diferenciais $R_{g*} : T_g G \rightarrow T_{hg}$ e $L_{g*} : T_g G \rightarrow T_{gh}$ que mapeiam um vetor tangente em g para um vetor tangente em hg e gh , respectivamente. No restante do texto vamos utilizar apenas a translação à esquerda.

Já que esses mapas são equivalentes, todos os desenvolvimentos podem ser obtidos para a translação à direita de maneira análoga.

Em coordenadas locais, o mapa diferencial é dado por

$$(L_g)_* = X^\mu(g) \frac{\partial x^\nu(gh)}{\partial x^\mu(g)} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Big|_{gh} \quad (\text{A.74})$$

e

$$X|_{gh} = X^\nu(gh) \frac{\partial}{\partial x^\nu}. \quad (\text{A.75})$$

Comparando (A.74) e (A.75), percebemos que

$$X^\nu(gh) = X^\mu(h) \frac{\partial x^\nu(gh)}{\partial x^\mu(g)} \quad (\text{A.76})$$

onde $x^\mu(h)$ e $x^\nu(gh)$ são as coordenadas h e gh , respectivamente. Ou seja, se conhecemos as componentes de $X|_h$, podemos calcular as componentes $X|_{gh}$. Isso significa que um campo vetorial invariante à esquerda é definido univocamente por seu valor em um único ponto. É natural que o elemento identidade $e \in G$ seja usado como referência, já que, seja $V = X|_e \in T_eG$

$$X|_g = (L_g)_* X_e \equiv L_{g*} V. \quad (\text{A.77})$$

Isto significa que podemos obter todo o campo vetorial invariante à esquerda a partir de um único vetor tangente em e . Da propriedade de composição de mapas diferenciais, temos que $X_V|_{gh} = (L_{hg})_* = (L_g L_h)_* V = L_{g*} L_{h*} V = L_{g*} X_V|_h$. Por outro lado, um campo vetorial invariante à esquerda X define de maneira unívoca o vetor $V = X|_e \in T_eG$. Representamos o conjunto de vetores invariantes à esquerda por \mathfrak{g} . Este conjunto é um espaço vetorial e o mapa $T_eG \rightarrow \mathfrak{g}$ é um isomorfismo, $T_eG \simeq \mathfrak{g}$ e, portanto, têm a mesma dimensão, $\dim \mathfrak{g} = \dim T_eG$. Já que $\mathfrak{g} \subset \mathfrak{X}(G)$, podemos calcular o colchete de Lie. Sejam X e $Y \in \mathfrak{g}$ dois vetores invariantes à esquerda, se aplicarmos L_{g*} a $[X, Y]$, temos

$$L_{g*}[X, Y]|_h = [L_{g*} X_h, L_{g*} Y_h] = [X_{gh}, Y_{gh}] = [X, Y]_{gh}. \quad (\text{A.78})$$

Ou seja, o colchete de Lie $[X, Y]$ também é um elemento de \mathfrak{g} . Dizemos que \mathfrak{g} é fechado sob o colchete de Lie.

Definição A.2.24. *O conjunto de vetores invariantes à esquerda munido do colchete de Lie $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ é chamado de álgebra de Lie de um grupo de Lie.*

Já que \mathfrak{g} é isomórfico ao espaço tangente a identidade T_eG , é comum considerar o segundo como a álgebra de Lie associada com o grupo de Lie. É comum que se represente o grupo de Lie com letras minúsculas em fonte gótica. Por exemplo, se o grupo de Lie é $SU(2)$, a álgebra de Lie é representada por $\mathfrak{su}(2)$.

A.2.11 O Subgrupo uniparamétrico

Como vimos anteriormente, um campo vetorial $X \in \mathfrak{X}(M)$ induz um fluxo em M . Iremos analisar agora os fluxos gerados por um campo vetorial invariante à esquerda.

Definição A.2.25. *Um subgrupo uniparamétrico de G $\phi : \mathbb{R} \rightarrow G$ é uma curva integral (um fluxo) induzida por um campo vetorial invariante à esquerda e que passa pela identidade e . Ou seja, ϕ é um homomorfismo que satisfaz as seguintes propriedades*

$$(i) \quad \phi(t)\phi(s) = \phi(t+s);$$

$$(ii) \quad (\phi)^{-1}(t) = \phi(-t) \text{ e}$$

$$(iii) \quad \phi(0) = e.$$

Um vetor $V \in \mathfrak{g}$ induz um único subgrupo uniparamétrico. Por outro lado, dado um subgrupo paramétrico $\phi : \mathbb{R} \rightarrow G$ existe um único campo vetorial que satisfaz a equação

$$\frac{d\phi^\mu}{dt} = X^\mu(\phi(t)). \quad (\text{A.79})$$

Ou seja, existe uma correspondência bijetiva entre um vetor invariante à esquerda (um elemento da álgebra de Lie) e um grupo uniparamétrico. Isso motiva a seguinte definição

Definição A.2.26. *Seja G um grupo de Lie e $V \in T_eG$. O mapa exponencial é definido por*

$$\exp V \equiv \phi_V(1) \quad (\text{A.80})$$

onde ϕ_V é um subgrupo uniparamétrico de G induzido por vetor invariante a esquerda $X_V|_g = (L_g)_*V$.

E já que se escalonarmos a parametrização t por uma constante, escalonamos também o vetor, então temos

$$\exp tV = \phi_V(t). \quad (\text{A.81})$$

Para um grupo matricial, o mapa exponencial é dado pela exponencial de uma matriz. Tomemos como exemplo $G = GL(n, \mathbb{R})$. Seja $A \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{R})$. Vamos definir um grupo uniparamétrico por $\phi_A : \mathbb{R} \rightarrow GL(n, \mathbb{R})$ por

$$\phi_A = I_n + tA + \frac{t^2}{2!}A^2 + \cdots + \frac{t^n}{n!}A^n + \cdots . \quad (\text{A.82})$$

Na verdade $\phi_A(t) \in GL(n, \mathbb{R})$ já que existe uma inversa $\phi_A(t)^{-1} = \phi_A(-t)$. É fato também que $\phi_A(t)\phi_A(s) = \phi_A(t+s)$. Assim, o mapa exponencial é dado por

$$\phi_A = I_n + A + \frac{1}{2!}A^2 + \cdots + \frac{1}{n!}A^n + \cdots . \quad (\text{A.83})$$

A curva $g \exp\{(tA)\}$ que passa por $g \in G$. Temos assim que

$$\left. \frac{d}{dt} g \exp\{(tA)\} \right|_{t=0} = (L_g)_* A = X_A|_g \quad (\text{A.84})$$

onde $X_A|_g$ é um campo vetorial invariante a esquerda induzido por A . Para um grupo matricial, temos então

$$X_A|_g = (L_g)_* A = gA. \quad (\text{A.85})$$

A curva $g \exp\{(tA)\}$ define um mapa $\sigma_t : G \rightarrow G$ por $\sigma_t(g) \equiv g \exp\{(tA)\}$ que também é expresso como uma translação à esquerda

$$\sigma_t(g) = R_{g \exp\{(tA)\}}. \quad (\text{A.86})$$

A.2.12 Constantes de estrutura da álgebra de Lie

Seja $\{V_1, \dots, V_n\}$ uma base de $T_e G$ em que $\dim G$ é finito. Já que o colchete $[V_\mu, V_\nu]$ é novamente um elemento da base, podemos escrevê-lo como uma combinação linear

$$[V_\mu, V_\nu] = c_{\mu\nu}{}^\lambda V_\lambda, \quad (\text{A.87})$$

em que os coeficientes $c_{\mu\nu}{}^\lambda$ são chamados de *constantes de estrutura*. A partir dessa base, podemos definir em cada ponto g em G um conjunto de vetores invariantes à esquerda X_1, \dots, X_n através do *pushforward* $(L_g)_*$, $X_\mu = (L_g)_* V_\mu$. Aplicando $(L_g)_*$ ao colchete de Lie, temos

$$(L_g)_*[V_\mu, V_\nu] = [(L_g)_* V_\mu, (L_g)_* V_\nu] = [X_\mu|_g, X_\nu|_g]; \quad (\text{A.88})$$

mas como

$$(L_g)_* c_{\mu\nu}{}^\lambda V^\lambda = c_{\mu\nu}{}^\lambda X_\lambda|_g, \quad (\text{A.89})$$

é verdade que

$$[X_\mu|_g, X_\nu|_g] = c_{\mu\nu}{}^\lambda X_\lambda|_g. \quad (\text{A.90})$$

O que demonstra que as constantes de estrutura são independentes do ponto g .

A.2.13 Constantes de estrutura da álgebra de Lie

Da propriedade de antissimetria do comutador, deduz-se a antissimetria das constantes de estrutura:

$$c_{\mu\nu}{}^\lambda = -c_{\nu\mu}{}^\lambda. \quad (\text{A.91})$$

E da identidade de Jacobi do comutador, podemos derivar a seguinte propriedade:

$$c_{\mu\nu}{}^\tau c_{\tau\rho}{}^\lambda + c_{\rho\mu}{}^\tau c_{\tau\nu}{}^\lambda + c_{\nu\rho}{}^\tau c_{\tau\mu}{}^\lambda. \quad (\text{A.92})$$

Seja $\mathfrak{g}^* \equiv T^*G$ a álgebra de Lie dual, podemos definir uma base dual $\{\theta^\mu\}$ tal que

$$\langle \theta^\mu, X_\mu \rangle = \delta_\mu{}^\nu. \quad (\text{A.93})$$

Analogamente aos vetores, uma p -forma $\omega \in \Omega^p(G)$ é invariante à esquerda se

$$L_g^* \omega|_h = \omega|_{g^{-1}h}, \quad \text{e} \quad (\text{A.94})$$

invariante a direita se

$$R_g^* \omega|_h = \omega|_{hg^{-1}}. \quad (\text{A.95})$$

O conjunto $\{\theta^\mu\}$ forma uma base para as formas invariantes à esquerda. As bases duais satisfazem a *equação de estrutura de Maurer-Cartan*

$$d\theta^\mu = -\frac{1}{2} c_{\nu\lambda}{}^\mu \theta^\nu \wedge \theta^\lambda. \quad (\text{A.96})$$

Definição A.2.27. Definimos uma 1-forma com valores na álgebra de Lie $\theta : T_e G \rightarrow T_e G$ por

$$\theta : X \mapsto (L_{g^{-1}})_* X = (L_g)_*^{-1} X \in T_g G. \quad (\text{A.97})$$

θ é chamada de 1-forma canônica ou forma de Maurer-Cartan em G .

Então a forma de Maurer-Cartan θ é a 1-forma com valores na álgebra de Lie em que o vetor tangente $X \in T_g G$ é levado de volta à unidade.

Teorema A.2.2. (a) A forma de Maurer-Cartan pode ser expandida como

$$\theta = V_\mu \otimes \theta^\mu \quad (\text{A.98})$$

onde $\{V_\mu\}$ é a base de $T_e G$ e $\{\theta^\mu\}$ é a base dual de $T_e^* G$.

(b) A forma de Maurer-Cartan θ satisfaz a equação

$$d\theta + \frac{1}{2}[\theta \wedge \theta] = 0. \quad (\text{A.99})$$

onde $d\theta = V_\mu \otimes d\theta^\mu$ e

$$[\theta \wedge \theta] \equiv [V_\mu, V_\nu] \otimes \theta^\mu \wedge \theta^\nu. \quad (\text{A.100})$$

A.2.14 Ações de grupos de Lie em variedades

Definição A.2.28. A ação a esquerda de um grupo de Lie em uma variedade é o mapa diferenciável $\sigma : G \times M \rightarrow M$ tal que

- $\sigma(e, p) = p \quad \forall p \in M, e \in G,$
- $\sigma(g_1, \sigma(g_2, p)) = \sigma(g_1 g_2, p), \quad g_1 g_2 \in G.$

Adotando a notação $\sigma(g, p) \equiv gp$. Nessa notação, as condições da definição passam a ser

1. $ep = p,$
2. $g_1(g_2 p) = (g_1 g_2)p.$

Exemplo A.2.8. Considere o grupo $G = GL(n, \mathbb{R})$ e a variedade $M = \mathbb{R}^n$. Seja $A \in GL(n, \mathbb{R})$ e $x \in \mathbb{R}^n$, então a ação de $GL(n, \mathbb{R})$ em \mathbb{R}^n

$$\sigma(A, x) = Ax \quad (\text{A.101})$$

é a multiplicação de usual de um vetor por uma matriz.

De forma análoga, podemos definir a ação a direita de G em M por $\sigma(g, p) \equiv gp$ com

1. $pe = p,$
2. $(pg_1)g_2 = p(g_1 g_2).$

Ação do grupo desloca um dado ponto $p \in M$ da variedade para outro

Definição A.2.29. A órbita através de p sob ação σ é definida por

$$G_p = \{\sigma(g, p) | g \in G\}. \quad (\text{A.102})$$

A.2.15 Campos vetoriais induzidos

Seja G um grupo de Lie que atua em M de forma $(g, x) \mapsto gx$. Um vetor campo vetorial invariante à esquerda induzido por $V \in T_e G$ naturalmente induz um campo vetorial em M . Definimos um fluxo em M por

$$\sigma(t, x) = \exp\{(tV)\}x, \quad (\text{A.103})$$

$\sigma(t, x)$ é um grupo uniparamétrico de transformações, e define um campo vetorial chamado de *campo vetorial induzido* denotado V^\sharp ,

$$V^\sharp|_x = \left. \frac{d}{dt} \exp\{(tV)\}x \right|_{t=0}. \quad (\text{A.104})$$

Assim, obtemos um mapa $\sharp : T_e G \rightarrow \mathfrak{X}$ definido por $V \mapsto V^\sharp$.

Exemplo A.2.9. Grupo $SO(2)$ atuando na variedade. O elemento A da álgebra de Lie é dado por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.105})$$

Usando (A.83), temos

$$\exp\{(tA)\} = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}. \quad (\text{A.106})$$

Podemos obter o fluxo que passa por $x \in \mathbb{R}$ usando (A.83),

$$\sigma(x, t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.107})$$

$$= (x^1 \cos t - x^2 \sin t, x^1 \sin t + x^2 \cos t), \quad (\text{A.108})$$

assim como campo vetorial induzido

$$X_V(x) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} = x^2 \frac{\partial}{\partial x^1} + x^1 \frac{\partial}{\partial x^2}. \quad (\text{A.109})$$

A.2.16 Representação adjunta

Vamos discutir como um grupo de Lie G age em si mesmo.

Definição A.2.30. Sejam $g, h \in G$, um grupo de Lie. Definimos um homomorfismo $ad_g : G \rightarrow G$ através da conjugação

$$ad_g : h \mapsto ghg^{-1}. \quad (\text{A.110})$$

Este homomorfismo é chamado de representação adjunta de G .

O mapa induzido no espaço tangente é dado por

$$(ad_g)_* : T_g G \mapsto T_{ghg^{-1}} G. \quad (\text{A.111})$$

Observa-se que como $ad_g(e) = heh^{-1} = e$, se restringirmos o mapa induzido a identidade de G , obtemos o mapa

$$Ad_g \equiv ad_{g*}|_{T_e G}. \quad (\text{A.112})$$

Lembrando que do isomorfismo $T_e G \cong \mathfrak{g}$, obtemos o mapa $Ad : G \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ chamado de *mapa adjunto* de G .

Se G é um grupo matricial, a representação adjunta é apenas uma operação matricial. Sejam $g \in G$ e $X_V \in \mathfrak{g}$ e seja $\sigma_V(t) = \exp\{(tV)\}$ um subgrupo paramétrico gerado por $V \in T_e G$. Então ad_g atuando em $\sigma_V(t) = \exp\{(tV)\}$ resulta em $g \exp\{(tV)\} g^{-1} = \exp\{(tgVg^{-1})\}$. Já para o mapa adjunto, temos

$$Ad_g V = \left. \frac{d}{dt} [ad_g \exp\{(tV)\}] \right|_{t=0} \quad (\text{A.113})$$

$$= \frac{d}{dt} \exp\{(tgVg^{-1})\} = gVg^{-1}. \quad (\text{A.114})$$

A.3 Fibrados

Um retângulo em \mathbb{R}^2 pode ser definido como produto topológico de dois segmentos de linha I_1 e I_2 . Um cilindro pode ser visto como o produto topológico de um círculo S^1 pelo segmento de linha I . Esses são exemplos de espaços que são localmente e globalmente descritos como produtos de espaços topológicos. Porém, temos objetos como a fita de Möbius, que localmente podem ser considerados produtos topológicos, mas não globalmente. Um *fibrado*, em termos intuitivos, é uma variedade com um espaço topológico ligado a cada ponto dela. A definição formal é dada por

Definição A.3.1. Um fibrado (E, π, M, F, G) consiste dos seguintes elementos

- (i) Um espaço topológico E chamado de espaço total;
- (ii) Um espaço topológico M chamado de espaço base;

- (iii) Uma função sobrejetiva $\pi : E \rightarrow M$;
- (iv) Um espaço F chamado de fibra típica. A imagem inversa $F_x = \pi^{-1}(x)$ com $x \in M$ são chamadas de fibras. A fibra típica é homeomorfa a todas as fibras, $F \cong F_x$;
- (v) Um grupo de Lie de homeomorfismos de F em si mesmo, chamado de grupo fibrado;
- (vi) Uma família de conjuntos abertos $\{U_i\}$ cobrindo M com homeomorfismos $\phi : U_i \times F \rightarrow \pi^{-1}(U_i)$ tal que $\pi \circ \phi(x, f) = x$. O mapa ϕ_i é chamado de trivialização local;
- (vii) Em um ponto fixo $x \in M$, o mapa $\phi_{i,x}(f) \equiv \phi(x, f) = x$ é um difeomorfismo $\phi_{i,x}(f) : F \rightarrow F_x$. Em cada sobreposição $U_i \cap U_j \neq \emptyset$, é necessário que $g_{ij} = \phi_{j,x}^{-1} \circ \phi_{i,x} : F \rightarrow F$ seja um elemento do grupo G , ou seja, $g_{ij} : U_i \cap U_j \rightarrow G$ tal que $\phi_j(x, f) = \phi_i(x, g_{ij}f)$. As funções g_{ij} são chamadas de função de transição.

Vamos utilizar de agora em diante a notação abreviada $E \xrightarrow{\pi} M$ para representar o fibrado (E, π, M, F, G) .

A ligação da definição intuitiva na introdução e da definição formal [A.3.1](#) é a seguinte. As trivializações locais, como o nome sugere, contêm a informação sobre a topologia local do fibrado, ou seja, com qual produto o fibrado se parece localmente. Já as funções de transição são as que nos informam sobre a topologia global do fibrado, que pode ser bem mais complicada que localmente. É através delas que determinamos como as fibras serão "torcidas" e "coladas". As funções de transição devem satisfazer algumas condições de consistência:

- (i) $g_{ii}(x) = 1, \quad x \in U_i$;
- (ii) $g_{ij}(x) = g_{ji}^{-1}(x), \quad x \in U_i \cap U_j$;
- (iii) $g_{ij}(x)g_{jk}(x) = g_{ik}(x), \quad x \in U_i \cap U_j \cap U_k$.

Outra propriedade é que podemos ter mais de uma função de transição dando origem ao mesmo fibrado. Sejam dois fibrados E e E' com a mesma base M , fibra F e grupo fibrado G . Sejam $\{U_i, \phi_i\}$ as coordenadas locais de E e $\{U_i, \psi_i\}$ as de E' . Em seguida definimos um mapa $\lambda_i := \phi_i \circ \psi_i^{-1}$, que é um homeomorfismo $\lambda_i : U_i \times F \rightarrow U_i \times F$ da fibra F e um elemento do grupo fibrado G . Assim, as funções de transição g_{ij} e g'_{ij} de E e E' , respectivamente, são relacionadas por

$$g'_{ij} = \lambda_i^{-1} g_{ij} \lambda_j \quad x \in U_i \cap U_j, \quad (\text{A.115})$$

já que

$$\lambda_i^{-1} g_{ij} \lambda_j = \psi_i \circ \phi_i^{-1} \circ \phi_i \circ \phi_j^{-1} \circ \phi_j \circ \psi_i^{-1} = \psi_i \psi_j^{-1} = g'_{ij}. \quad (\text{A.116})$$

A condição $\lambda_i \in G$ implica que, à medida que g_{ij} varia, o g'_{ij} da outra escolha de coordenadas locais também varia, gerando todos os elementos do grupo G . Dizemos então que os dois fibrados E e E' são topologicamente equivalentes; eles diferem apenas na escolha de coordenada local ϕ_i e ψ_i .

Interessante notar que, como veremos nas próximas seções, em aplicações na física, as funções de transição g_{ij} são as transformações de calibre que conectam as coordenadas locais, enquanto que o homeomorfismo λ_i corresponde aos graus de liberdade de calibre na coordenada.

Definição A.3.2. *Seja $E \xrightarrow{\pi} M$ um fibrado. Uma seção é uma aplicação suave $\sigma : M \rightarrow E$ e satisfaz $\pi \circ \sigma = id$. A imagem de $\sigma(p)$, para $p \in M$, é um elemento de $F_x = \pi^{-1}(x)$. O conjunto de seções em M é representado por $\Gamma(M, F)$. Se a seção é definida apenas sobre um subconjunto aberto $U \subset M$, ela é chamada de seção local. Por exemplo, podemos definir um campo vetorial em M como uma seção de um fibrado tangente, ou seja, um mapa $\sigma : M \rightarrow TM$ tal que $\pi \circ \sigma = id$. O conjunto de todos os campos vetoriais em M é representado por $\Gamma(M, TM)$.*

Definição A.3.3. *Dado um fibrado (E, π, M, F, G) , se tomarmos a mesma base, as mesmas funções de transição g_{ij} , mas agora com a fibra idêntica ao próprio grupo de estrutura $F \equiv G$, construímos o chamado fibrado principal, representado por $P \xrightarrow{\pi} M$ ou $P(M, G)$. Como antes, as funções de transição atuam à esquerda.*

Na maioria das vezes, G será um grupo de Lie. Isso não é verdade apenas para o caso da fita de Möbius, por exemplo. A ação do grupo fibrado na fibra é agora apenas a multiplicação à esquerda do grupo G . Podemos também introduzir uma ação de G em um elemento $p \in P$. Seja $\phi_i : U_i \times G \rightarrow \pi^{-1}(U_i)$ uma trivialização local,

$$\phi_i^{-1}(p) = (x, g_i), \quad x = \pi(p). \quad (\text{A.117})$$

A ação à direita por um elemento a de G é definida por

$$pa = \phi_i(x, g_i a). \quad (\text{A.118})$$

Já que as ações à direita e à esquerda comutam, esta ação é independente da escolha de coordenadas locais. Seja $x \in U_i \cap U_j$, então

$$pa = \phi_j(x, g_j a) = \phi_j(x, g_{ji} a) = \phi_i(x, g_i a). \quad (\text{A.119})$$

Logo, podemos definir a ação à direita como $P \times G \rightarrow P : (p, a) \mapsto pa$, sem fazer referência a escolhas de coordenadas locais.

Definição A.3.4. Um fibrado vetorial $E \xrightarrow{\pi} M$ é um fibrado cuja fibra é um espaço vetorial. Se a fibra é um espaço vetorial n -dimensional real, as funções de transição pertencem ao grupo $GL(n, \mathbb{R})$.

Definição A.3.5. Seja $E \xrightarrow{\pi} M$ um fibrado vetorial e ρ uma representação de G no espaço vetorial $V \equiv F$. Chamamos este fibrado de fibrado associado ao fibrado principal se as funções de transição são dadas pela aplicação da representação às funções de transição de P , $\rho(\phi)$.

Exemplo A.3.1. O fibrado tangente TM sobre uma variedade de dimensão n é uma união disjunta de todos os espaços tangentes de M :

$$E = TM = \bigcup_{x \in M} T_x M. \quad (\text{A.120})$$

A projeção π é definida por

$$TM \rightarrow M \quad (\text{A.121})$$

$$V \in T_x M \mapsto x. \quad (\text{A.122})$$

A fibra acima de um ponto $x \in M$ é homeomorfa ao espaço tangente $\pi^{-1}(x) = T_x M$. A fibra típica é $F = \mathbb{R}^n$. Para a trivialização local, precisamos do homeomorfismo ϕ_i em algum aberto $U_i \subset M$. U_i é homeomorfo a \mathbb{R}^n , $U_i \simeq \mathbb{R}^n$, e também $T_x M \simeq \mathbb{R}^n$. Em coordenadas locais, o vetor tangente v é dado por $v = v^i(x) \frac{\partial}{\partial x^i}$, tal que o homeomorfismo

$$\phi_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow U_i \times T_x M \quad (\text{A.123})$$

$$v \mapsto (x, v^i(x)) \quad (\text{A.124})$$

e localmente o fibrado tangente tem a estrutura de produto direto

$$TU_i = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n. \quad (\text{A.125})$$

Dadas duas coordenadas (ϕ_α, U_α) e (ψ_β, U_β) , em um ponto $x \in U_\alpha \cap U_\beta$, o vetor v tem duas representações

$$v = v^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \Big|_p = \tilde{v}^\beta \frac{\partial}{\partial y^\beta} \Big|_p. \quad (\text{A.126})$$

Elas estão relacionadas pelas funções de transição

$$g_{\alpha\beta}^{ij} = \phi_\alpha^{-1} \circ \psi_\beta = \frac{\partial y^i}{\partial x^j}. \quad (\text{A.127})$$

Assim, o grupo fibrado é dado por $G = GL(n, \mathbb{R})$. Uma seção $\sigma : M \rightarrow TM$ em um fibrado tangente é um campo sobre M . O conjunto de todos os campos vetoriais $\mathfrak{X}(M)$ em M é identificado com o conjunto de todas as seções em um fibrado tangente TM , $\mathfrak{X}(M) \equiv \Gamma(M, TM)$.

A.4 Conexões em Fibrados e Teoria de Calibre

Nesta seção, abordaremos o conceito de conexões em fibrados principais. Embora os matemáticos tenham desenvolvido essa teoria de forma independente da física, a linguagem de conexões em fibrados se tornou indispensável para a física moderna, em especial na teoria de Yang-Mills e na relatividade geral. A partir das conexões, poderemos introduzir o transporte paralelo entre as fibras e o conceito de holonomia, que são importantes para entender o papel da topologia em fenômenos quânticos, em particular o efeito AB.

Seja u um elemento de um fibrado principal $P(M, G)$ e G_p a fibra acima do ponto $p = \pi(u) \in M$, o espaço base. Seja também T_uP o espaço tangente a P no ponto u . Definimos o *subespaço vertical* V_uP como um subespaço de T_uP que é tangente a G_p . Vejamos como V_uP é construído. Tomamos um elemento $A \in T_eG \simeq \mathfrak{g}$. Podemos definir uma curva em P que passa por u pela ação à direita de G em P :

$$\sigma(t, u) = R_{\exp\{(tA)\}} = u \exp\{tA\}. \quad (\text{A.128})$$

Já que $\pi(u) = \pi(u)u \exp\{tA\} = p$, o fluxo $\sigma(t, u)$ está ao longo de G_p . A ação do grupo uniparamétrico de transformações $\phi_A : t \rightarrow \exp\{(tA)\}$ induz um campo vetorial

$$X_A f(u) = \left. \frac{d}{dt} f(u \exp\{(tA)\}) \right|_{t=0}, \quad (\text{A.129})$$

chamado de *campo vetorial fundamental*, onde $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função suave. Um vetor $A^\# \in X_A$ é tangente a P em u , portanto $A^\# \in V_uP$. Existe então um isomorfismo $\iota : \mathfrak{g} \rightarrow V_uP$ dado por $\iota : A \mapsto A^\#$. O complemento de V_uP em T_uP é chamado de *espaço horizontal* H_uP e é unicamente determinado pela escolha de uma conexão em P .

A.5 Conexões em Fibrados e Teoria de Calibre

Nesta seção, abordaremos o conceito de conexões em fibrados principais. Embora os matemáticos a tenham desenvolvido de maneira independente da física, a linguagem de conexões em fibrados tornou-se indispensável para a física moderna, especialmente na teoria de Yang-Mills e na relatividade geral. A partir das conexões, poderemos introduzir o transporte paralelo entre as fibras e o conceito de holonomia, que são importantes para entender o papel da topologia em fenômenos quânticos, em particular, o efeito AB.

Seja u um elemento de um fibrado principal $P(M, G)$ e G_p a fibra acima do ponto $p = \pi(u) \in M$, o espaço base. Seja também T_uP o espaço tangente a P no ponto u . Definimos o *subespaço vertical* V_uP como um subespaço de T_uP que é tangente a G_p . Vejamos como V_uP é construído. Tomamos um elemento $A \in T_eG \simeq \mathfrak{g}$. Podemos definir uma curva em P que passa através de u pela ação à direita de G em P :

$$\sigma(t, u) = R_{\exp\{tA\}}(u) = u \exp\{tA\}. \quad (\text{A.130})$$

Já que $\pi(u) = \pi(u)u \exp\{tA\} = p$, o fluxo $\sigma(t, u)$ está ao longo de G_p . A ação do grupo uniparamétrico de transformações $\phi_A : t \rightarrow \exp\{tA\}$ induz um campo vetorial

$$X_A f(u) = \left. \frac{d}{dt} f(u \exp\{tA\}) \right|_{t=0}, \quad (\text{A.131})$$

chamado de *campo vetorial fundamental*, onde $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função suave. Um vetor $A^\# \in X_A$ é tangente a P em u e, portanto, $A^\# \in V_uP$. Existe então um isomorfismo $\iota : \mathfrak{g} \rightarrow V_uP$ dado por $\iota : A \mapsto A^\#$. O complemento de V_uP em T_uP é chamado de *espaço horizontal* H_uP e é univocamente determinado pela escolha de uma conexão em P .

Definição A.5.1. *Seja $P(M, G)$ um fibrado principal. Uma conexão é uma atribuição suave a cada ponto $u \in P$ de um subespaço $H_uP \subset T_uP$ tal que*

$$(i) \quad T_uP = H_uP \oplus V_uP;$$

$$(ii) \quad H_{ug}P = R_{g*}H_uP.$$

A condição (i) garante que qualquer vetor tangente $X \in T_uP$ pode ser separado em uma componente horizontal $X^H \in H_uP$ e uma vertical $X^V \in V_uP$ tal que $X = X^H + X^V$. Já a condição (ii) estabelece que dois subespaços horizontais $H_{ug}P$ e H_uP na mesma fibra estão

relacionados pelo mapa diferencial R_{g^*} induzido pela ação à direita R_g . Dessa forma, um subespaço horizontal H_uP em $u \in P$ gera todos os subespaços horizontais na mesma fibra. Isto garante que se um ponto u é transportado paralelamente outro ponto $ug, g \in G$ também é transportado paralelamente.

A definição acima tem um caráter geométrico bem claro e intuitivo. No entanto, precisamos de outra definição - que, a princípio, pode não parecer, mas é equivalente - mais adequada para fazer cálculos práticos.

Definição A.5.2. *Uma 1-forma de conexão $\omega \in \mathfrak{g} \otimes T^*P$ é uma 1-forma com valores na álgebra de Lie, definida pela projeção do espaço tangente T_uP no subespaço vertical V_uP satisfazendo as seguintes condições*

$$(i) \quad \omega(A^\#) = A \text{ para } A \in \mathfrak{g};$$

$$(ii) \quad R_g^* \omega = Ad_{g^{-1}} \omega.$$

O mapa R_g^* é o pullback (veja a seção A.2.5) da ação à direita e $Ad : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ é a representação adjunta (veja a seção A.2.16) dada por $Ad : A \mapsto g^{-1}Ag$. Então, para qualquer $X \in T_uP$, temos

$$R_g^* \omega_{ug}(X) = \omega_{ug}(R_g^* X = g^{-1} \omega_{ug} g). \quad (\text{A.132})$$

Com esta definição de 1-forma de conexão, podemos definir o subespaço horizontal H_uP pelo núcleo de ω ,

$$H_uP \equiv \{X \in T_uP \mid \omega(X) = 0\}. \quad (\text{A.133})$$

Vejamos então como as definições A.5.1 e A.5.2 são equivalentes. A equação (A.133) leva a uma separação de T_uP em uma soma direta $T_uP = V_uP \oplus H_uP$, e também satisfaz a propriedade $H_{ug}P = R_{g^*} H_uP$. Para demonstrar isso, façamos o seguinte. Tomamos um elemento $X \in H_uP$ e construímos $R_{g^*} X \in T_{ug}P$. Devemos então demonstrar que $R_{g^*} X$ é um elemento de $H_{ug}P$:

$$\omega(R_{g^*} X) = R_g^* \omega(X) = Ad_{g^{-1}} \omega(X) = g^{-1} \omega(X) g = 0. \quad (\text{A.134})$$

Assim, qualquer vetor $Y \in H_{ug}P$ pode ser expressado como $Y = R_{g^*} X$ para algum $X \in H_uP$. Portanto, as definições A.5.1 e A.5.2 são equivalentes.

A.5.1 1-forma de conexão local e potenciais de calibre

A ponte entre as conexões em um fibrado principal apresentadas aqui e a linguagem das teorias de calibre ficará evidente nesta seção. Veremos como a representação local das 1-formas de conexão nas variedades de base podem ser identificadas com os potenciais nas teorias de calibre de Yang-Mills.

Seja $\{U_i\}$ uma cobertura aberta em M . Escolhemos uma seção local σ^i em U_i tal que

$$\sigma : U_i \rightarrow \pi^{-1}(U_i). \quad (\text{A.135})$$

Definimos então uma *1-forma de conexão* A_i como uma 1-forma com valores na álgebra de Lie em U_i , dada por

$$A_i \equiv \sigma_i^* \omega \in \mathfrak{g} \oplus \Omega^1(U_i), \quad (\text{A.136})$$

onde σ_i^* é o “pullback” de σ_i . O caminho inverso também é válido. Ou seja, dada uma 1-forma local A_i em U_i , podemos reconstruir uma 1-forma de conexão ω , cujo “pullback” é $A_i = \sigma_i^* \omega$. A forma explícita é

$$\omega_i = g_i^{-1} \pi^* \mathcal{A}_i g_i + g_i^{-1} d_p g_i \quad (\text{A.137})$$

onde d_p é a derivada exterior no fibrado P e g_i expressa uma coordenada local do fibrado dada pela trivialização local canônica, que é definida pelo homeomorfismo

$$\phi_i : \pi^{-1}(U_i) \rightarrow U_i \times F \quad (\text{A.138})$$

$$u \mapsto (p, g_i), \quad (\text{A.139})$$

Assim,

$$\phi_i(u) = (p, g_i) \quad \text{com} \quad u = \sigma_i(p)g_i. \quad (\text{A.140})$$

A prova pode ser encontrada na Ref. [156].

Para que ω seja definido de maneira única em P , ou seja, para que a decomposição $T_u P = H_u P \oplus V_u P$ seja única, devemos ter $\omega_i = \omega_j$ na sobreposição $U_i \cap U_j$ de duas vizinhanças U_i e U_j . Como consequência, as conexões locais devem obedecer a uma *condição de compatibilidade* apropriada, a saber

$$\mathcal{A}_j = g_{ij}^{-1} \mathcal{A}_i g_{ij} + g_{ij}^{-1} d g_{ij}. \quad (\text{A.141})$$

Consideramos duas cartas U_1 e U_2 . Tome duas seções locais σ_1 e σ_2 em $U_1 \cap U_2$, tal que $\sigma_1(x) = \sigma_2(x)g(x)$. Então as formas locais \mathcal{A}_1 e \mathcal{A}_2 são relacionadas por

$$\mathcal{A}_2(x) = g^{-1}(x) \mathcal{A}_1(x) g(x) + g^{-1}(x) d g(x). \quad (\text{A.142})$$

Expandindo em termos das componentes, $\mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}$, $\mathcal{A}_2 \rightarrow \mathcal{A}'$ e $\mathcal{A} = \mathcal{A}_\mu dx$, $d = \partial_\mu dx^\mu$, temos

$$\mathcal{A}'(x) = g^{-1}(x)\mathcal{A}g(x) + g^{-1}(x)\partial_\mu g(x). \quad (\text{A.143})$$

A equação (A.143) é a *transformação de calibre* bem conhecida na física.

Exemplo A.5.1. No caso da eletrodinâmica, P é um fibrado com $G = U(1)$ e $M = \mathbb{R}^{1,3}$. Sejam dois abertos U_i e $U_j \in M$ que se sobrepõem e \mathcal{A}_i e \mathcal{A}_j seus respectivos potenciais locais. As funções transição $g_{ij} : U_i \cap U_j \rightarrow U(1)$ são dadas por

$$g_{ij}(x) = \exp\{i\lambda(x)\} \quad \lambda(x) \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.144})$$

As formas locais são relacionadas por

$$\mathcal{A}_j = g_{ij}^{-1}(x)\mathcal{A}_i g_{ij}(x) + g_{ij}^{-1}(x)dg_{ij}(x) \quad (\text{A.145})$$

$$= \mathcal{A}_i + id\lambda(x). \quad (\text{A.146})$$

Em função das coordenadas locais, temos a conhecida expressão

$$\mathcal{A}_{j\mu} = \mathcal{A}_{i\mu} + id\lambda(x). \quad (\text{A.147})$$

A.5.2 Levantamento horizontal e transporte paralelo

Definição A.5.3. Seja PM, G um fibrado e $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ uma curva em M . Uma curva $\tilde{\gamma} : [0, 1] \rightarrow P$ é chamada de *levantamento horizontal* de γ se $\pi \circ \tilde{\gamma} = \gamma$ e o vetor tangente a $\tilde{\gamma}(t)$ sempre pertencem a $H_{\tilde{\gamma}}$.

Seja \tilde{X} um vetor tangente a $\tilde{\gamma}$. Por definição, a condição $\omega(\tilde{X}) = 0$ deve ser satisfeita. Esta condição nos leva a uma equação de diferencial ordinária (EDO), e o teorema fundamental das EDO garante a existência e a unicidade do levantamento horizontal.

Teorema A.5.1. Seja $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ uma curva e $u_0 \in \pi^{-1}(\gamma(0))$. Então existe um único levantamento horizontal $\tilde{\gamma}$ em P tal que $\tilde{\gamma}(0) = u_0$.

Seja γ uma curva contida uma carta U_i e σ_i uma seção sobre U_i . Se existe um levantamento horizontal, ele pode ser expressado como $\tilde{\gamma} = \sigma_i(\gamma(t))g_i(t)$, onde $g_i(t)$ representa $g_i(\gamma(t)) \in G$. Seja X é o vetor tangente a $\gamma(t)$ em $\gamma(t)$, então $\tilde{X} = \tilde{\gamma}_* X$ é o vetor tangente a $\tilde{\gamma}$ em $u_0 = \tilde{\gamma}(0)$.

Já que o vetor tangente \tilde{X} é horizontal, deve satisfazer $\omega(\tilde{X}) = 0$. Utilizando a equação (A.137), obtemos uma EDO [157], a saber

$$\frac{dg_i(t)}{dt} = -\mathcal{A}_i g_i(t), \quad (\text{A.148})$$

cuja solução para $g_i(0) = e$ é

$$g_i(\gamma(t)) = \mathcal{P} \exp \left(- \int_0^t \mathcal{A}_{i\mu} \frac{dx^\mu}{dt} dt \right) \quad (\text{A.149})$$

$$= \mathcal{P} \exp \left(- \int_{\gamma(0)}^{\gamma(t)} \mathcal{A}_{i\mu}(\gamma(t)) dx^\mu \right), \quad (\text{A.150})$$

onde \mathcal{P} é o operador de ordenação de caminhos ao longo de $\gamma(t)$. O levantamento horizontal é então dado por $\tilde{\gamma}(t) = \sigma_i(\gamma(t))g_i(\gamma(t))$.

Definição A.5.4. *Seja $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ uma curva. Tome um ponto $u_0 \in \pi^{-1}(\gamma(0))$. Existe um único levantamento horizontal $\tilde{\gamma}$, e portanto um único ponto $u_1 = \tilde{\gamma}(1) \in \pi^{-1}(\gamma(1))$. O ponto u_1 é chamado de transporte paralelo de u_0 ao longo da curva γ . Isto define o mapa $\Gamma(\tilde{\gamma}) : \pi^{-1}(\gamma(0)) \rightarrow \pi^{-1}(\gamma(1))$ tal que $u_0 \mapsto u_1$. Se a forma local de (A.150), temos*

$$u_1 = \sigma_i(1) \mathcal{P} \exp \left(- \int_{\gamma(0)}^{\gamma(1)} \mathcal{A}_{i\mu}(\gamma(t)) dx^\mu \right). \quad (\text{A.151})$$

O transporte paralelo comuta com a ação a direita. Isto permite que transportemos pontos entre as fibras no fibrado principal primeiro aplicando o transporte paralelo e depois a ação a direita e vice-versa.

A.5.3 Holonomia

Um laço em M é definido como uma curva γ com $\gamma(0) = \gamma(1) = p$. Se tomarmos o levantamento horizontal de γ , $\tilde{\gamma}$ com $\tilde{\gamma}(0) = u_0$ não há garantias de que ele terminará no mesmo ponto, ou seja, $\tilde{\gamma}(1) = u_1$ não é necessariamente igual a u_0 . Porém, a condição de que $\pi \circ \tilde{\gamma} = \gamma$ implica que $\tilde{\gamma}(0)$ e $\tilde{\gamma}(1)$ pertencem à mesma fibra. Isto significa que $\tilde{\gamma}(0)\tilde{\gamma}(1) = p_0g$ para algum $g \in G$.

Definição A.5.5. *Seja uma conexão ω definida no fibrado principal $P(M, G)$ e seja $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ um laço em $p \in M$, isto é, $\gamma(0) = \gamma(1) = p$. O subgrupo de G*

$$\Psi_p \equiv \{g \in G \mid \tilde{\gamma}(1) = u_0g, \text{ para um laço } \gamma\} \quad (\text{A.152})$$

é chamado de grupo de holonomia no ponto p .

A.6 Curvatura

Nesta seção, abordaremos o conceito de curvatura em fibrados principais. Para iniciar nossa discussão, é necessário compreendermos a derivada covariante em um fibrado principal.

A.6.1 Derivada covariante em fibrados principais

Na seção A.2.3, definimos um tensor do tipo (p, q) \mathcal{T}_q^p como um mapa multilinear com valores em \mathbb{R} . Vamos generalizar este conceito para que \mathcal{T}_q^p tenha valores em um espaço vetorial V de dimensão k . Assim, poderemos atuar a derivada exterior $d : \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{p+1}(M)$ (seção A.2.8) em uma p -forma $\phi \in \Omega^p(P) \otimes V$,

$$\phi : TP \wedge \cdots \wedge TP \rightarrow V. \quad (\text{A.153})$$

A forma mais geral de ϕ é $\phi = \sum_{\alpha=1}^k \phi^\alpha \otimes e_\alpha$, em que $\{e_\alpha\}$ é uma base de V e $\phi^\alpha \in \Omega^p(P)$.

Definição A.6.1. *Seja $\phi \in \Omega^p(P) \otimes V$ e $X_1, \dots, X_{r+1} \in T_u P$. A derivada covariante de ϕ é definida por*

$$D\phi(X_1, \dots, X_{r+1}) \equiv d_p\phi(X_1^H, \dots, X_{r+1}^H), \quad (\text{A.154})$$

em que $d_p\phi \equiv \phi^\alpha \otimes e_\alpha$ e X_i^H é a parte horizontal de X_i .

Podemos então definir a curvatura em fibrados principais.

A.6.2 Curvatura

A 2-forma de curvatura é a derivada covariante da 1-forma de conexão ω ,

$$\Omega \equiv D\omega \in \Omega^2(P) \in \mathfrak{g} \quad (\text{A.155})$$

Proposição A.6.1. *A 2-forma de curvatura satisfaz a propriedade $R_g^*\Omega = Ad_{g^{-1}} = g^{-1}\Omega g$.*

Demonstração. A prova é simples e pode ser encontrada em [156] na pág. 386. □

Teorema A.6.1. *Sejam $X, Y \in T_u P$. Ω e ω satisfazem a equação de estrutura de Cartan*

$$\Omega(X, Y) = d_p\omega(X, Y) + [\omega(X), \omega(Y)], \quad (\text{A.156})$$

que também pode ser escrita como

$$\Omega = d_p\omega + \omega \wedge \omega. \quad (\text{A.157})$$

Demonstração. Página 387 da Ref. [156]. □

A.6.3 Forma local da curvatura

Vamos novamente usar, assim como fizemos para a conexão ω , uma seção local para representar a curvatura Ω , que é definida globalmente em P , em uma carta U em M .

A forma local \mathcal{F} da curvatura Ω é definida por

$$\mathcal{F} \equiv \sigma^* \Omega. \quad (\text{A.158})$$

Usando a equação (A.157) em (A.158), obtemos a curvatura em função dos potenciais como

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \sigma^* d_p \omega + \sigma^* \omega \wedge \sigma^* \omega = d_p(\sigma^* \omega) + \sigma^* \omega \wedge \sigma^* \omega \\ &= d\mathcal{A} + \mathcal{A} \wedge \mathcal{A}. \end{aligned} \quad (\text{A.159})$$

Podemos escrever \mathcal{F} e \mathcal{A} em termos de coordenadas locais $x^\mu = \varphi(p)$ em U como $\mathcal{A} = \mathcal{A}_\mu dx^\mu$ e $\mathcal{F} = \frac{1}{2} \mathcal{F}_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu$. Substituindo em (A.159), encontramos a expressão para as componentes de \mathcal{F} em U :

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu + [\mathcal{A}_\mu, \mathcal{A}_\nu]. \quad (\text{A.160})$$

A ação de \mathcal{F} em vetores X e $Y \in T_M$ é dada por

$$\mathcal{F}(X, Y) = d\mathcal{A}(X, Y) + [\mathcal{A}(X), \mathcal{A}(Y)]. \quad (\text{A.161})$$

Podemos notar que a forma local da curvatura \mathcal{F} está relacionada com os campos nas teorias de Yang-Mills, em que G , o grupo do fibrado principal, é o grupo de *calibre* da teoria. Já que \mathcal{F} e \mathcal{A} são funções com valores em \mathfrak{g} , podemos expandi-las em termos da base $\{T_a\}$ de \mathfrak{g} como

$$\mathcal{A}_\mu = A_\mu^a T_a, \quad \mathcal{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a T_a. \quad (\text{A.162})$$

Lembrando que os vetores de base obedecem à relação de comutação $[T_a, T_b] = f_{ab}^c T_c$, obtemos a conhecida expressão

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + f_{bc}^a A_\mu^b A_\nu^c. \quad (\text{A.163})$$

Teorema A.6.2. *Sejam U_i e U_j duas cartas em M que se sobrepõem, e \mathcal{F}_i e \mathcal{F}_j os campos definidos nas respectivas cartas. Em $U_i \cap U_j$, eles satisfazem a condição de compatibilidade*

$$\mathcal{F}_j = g_{ij}^{-1} \mathcal{F}_i g_{ij}. \quad (\text{A.164})$$

Demonstração. Basta substituir (A.141) em $\mathcal{F}_j = d\mathcal{A}_j + \mathcal{A}_j \wedge \mathcal{A}_j$. Para mais detalhes, consulte a Ref. [156], pág. 390. □

Se duas seções são relacionadas por $\sigma'(x) = \sigma(x)g(x)$, os campos correspondentes são relacionados por

$$F'(x) = g^{-1}(x)F(x)g(x). \quad (\text{A.165})$$

Para demonstrar a equação acima, basta substituir a lei de transformação do potencial local (A.143) em (A.159).

A.6.4 Identidade de Bianchi

A *identidade de Bianchi* é dada por

$$D\Omega = 0. \quad (\text{A.166})$$

Esta identidade é demonstrada da seguinte forma. Já que ω e Ω têm valores em \mathfrak{g} , podemos expandi-las em termos da base $\{T_a\}$ de \mathfrak{g} como $\omega = \omega^a T_a$ e $\Omega = \Omega^a T_a$. Assim, a equação (A.157) fica

$$\Omega^a = d_p \omega^a + f_{bc}^a \omega^b \wedge \omega^c. \quad (\text{A.167})$$

Aplicando a derivada exterior na expressão acima, temos

$$d_p \Omega^a = f_{bc}^a d_p \omega^b \wedge \omega^c + f_{bc}^a \omega^b \wedge d_p \omega^c. \quad (\text{A.168})$$

Lembrando que $\omega(X) = 0$ para um vetor horizontal X , temos que

$$D\Omega(X, Y, Z) = d_p \omega(X^H, Y^H, Z^H) = 0, \quad (\text{A.169})$$

onde $X, Y, Z \in T_u P$. Assim, a identidade de Bianchi está demonstrada.

Podemos obter a forma local da identidade de Bianchi usando o “pullback” de σ em (A.157). Do lado esquerdo, então, temos $\sigma^* d_p \Omega = d\sigma^* \Omega = d\mathcal{F}$. Do lado direito, temos

$$\sigma^*(d_p \omega \wedge \omega + \omega \wedge d_p \omega) = (d_p \sigma^* \omega \wedge \sigma^* \omega + \sigma^* \omega \wedge d_p \sigma^* \omega) \quad (\text{A.170})$$

$$= d\mathcal{A} \wedge \mathcal{A} - \mathcal{A} \wedge d\mathcal{A} = \mathcal{F} \wedge \mathcal{A} - \mathcal{A} \wedge \mathcal{F}. \quad (\text{A.171})$$

Assim, obtemos que

$$\mathcal{D}\mathcal{F} = d\mathcal{F} + [\mathcal{A}, \mathcal{F}] = 0. \quad (\text{A.172})$$

A ação de \mathcal{D} em uma p-forma η com valores em \mathfrak{g} em M é definida por

$$\mathcal{D}\eta \equiv d\eta + [\mathcal{A}, \eta]. \quad (\text{A.173})$$

A.6.5 Derivada covariante em fibrados vetoriais associados

Em linguagem de fibrados, campos de matéria são associados a seções em fibrados vetoriais associados com fibrados principais. Por exemplo, um campo escalar na eletrodinâmica quântica pode ser entendido como uma seção de um fibrado linha complexo que está associado a um fibrado principal que descreve a simetria $U(1)$ das interações eletromagnéticas. Portanto, é importante saber diferenciar seções de maneira covariante. Uma forma de conexão ω em um fibrado principal P oferece uma maneira de definir derivadas covariantes em fibrados vetoriais associados a P .

Seja $P(M, G)$ um fibrado principal com uma projeção π_p . Considere uma carta U_i de M , uma seção σ_i sobre U_i e a trivialização canônica $\phi_i(p, e) = \sigma_i(p)$. Seja também $\tilde{\gamma}$ o levantamento horizontal de uma curva $\gamma : [0, 1] \rightarrow U_i$ com $\gamma(0) = p_0$ e $\tilde{\gamma}(0) = u_0$. Associado a P temos um fibrado vetorial $E = P \times_\rho V$ com uma projeção π_E . Sejam $X \in T_p M$ um vetor tangente a $\gamma(t)$ em p_0 e $s \in \Gamma(M, E)$ uma seção, ou um campo vetorial em M . Representamos um elemento de E como um $[(u, v)] = \{ug, \rho(g)^{-1}v | u \in P, v \in V, g \in G\}$. Escolher um representante da classe de equivalência equivale a “fixar o calibre”. Escolhemos então a seguinte forma

$$s(p) = [(\sigma_i(p), \xi(p))] \quad (\text{A.174})$$

como um representante. Vamos definir o transporte paralelo de um vetor em E ao longo de uma curva em M . Um vetor é transportado paralelamente se ele é constante com respeito a um levantamento horizontal $\tilde{\gamma}$ de γ em P . Em outras palavras, uma seção $s(\gamma(t) = [(\tilde{\gamma}(t), \eta(\gamma(t)))]$ é transportada paralelamente se η é constante ao longo de $\gamma(t)$. Esta definição é intrínseca (não depende da seção) já que se $\tilde{\gamma}'$ é outro levantamento horizontal de γ , então pode ser escrito como $\tilde{\gamma}' = \tilde{\gamma}g$, $g \in G$, e temos

$$[\tilde{\gamma}, \eta(t)] = [\tilde{\gamma}', g^{-1}\eta(t)] \quad (\text{A.175})$$

onde $\eta(t)$ representa $\eta(\gamma(t))$. Portanto, se $\eta(t)$ é constante ao longo de $\gamma(t)$, então seu múltiplo constante $g^{-1}\eta(t)$ também é. Agora, podemos definir a derivada covariante. A derivada covariante de $s(t)$ ao longo de $\gamma(t)$ em $p_0 = \gamma(0)$ é definida por

$$\nabla_X s \equiv \left[\left(\tilde{\gamma}(0), \frac{d}{dt} \eta(\gamma(t)) \Big|_t = 0 \right) \right] \quad (\text{A.176})$$

onde X é o vetor tangente a $\gamma(t)$ em p_0 . Para que a definição apresentada seja realmente intrínseca, não deve depender da informação extra, que é o levantamento horizontal. Seja $\tilde{\gamma}' =$

$\tilde{\gamma}g$, $g \in G$, outro levantamento horizontal de γ . Se escolhermos $\tilde{\gamma}'(t)$ como “o” levantamento horizontal, temos o um representante $[(\tilde{\gamma}(t), g^{-1}\eta(t))]$. A derivada covariante agora é dada por

$$\nabla_X s \equiv \left[\left(\tilde{\gamma}'(0), \frac{d}{dt} \{g^{-1}\eta(t)\} \Big|_t = 0 \right) \right] = \left[\left(\tilde{\gamma}'(0)g^{-1}, \frac{d}{dt} \{\eta(t)\} \Big|_t = 0 \right) \right] \quad (\text{A.177})$$

que concorda com (A.176). Logo, $\nabla_X s$ depende apenas do vetor tangente X e das seções $s \in \Gamma(M, E)$ e não do levantamento horizontal. Nossa definição depende apenas de uma curva γ e de uma conexão, e não de trivializações locais.

Até agora, definimos a derivada covariante em um ponto $p_0 = \gamma(0)$. Está claro que se X é um campo vetorial, ∇_X mapeia uma seção s em uma nova seção $\nabla_X s$, então podemos considerar ∇_X como um mapa $\Gamma(M, E) \rightarrow \Gamma(M, E)$. Para ser mais preciso, tome $X \in \mathfrak{X}(M)$ cujo valor em p é $X_p \in T_p M$. Existe uma curva $\gamma(t)$ tal que $\gamma(0) = p$ e sua tangente em p é X_p . Assim, qualquer levantamento horizontal $\tilde{\gamma}(t)$ de γ nos permite calcular a derivada covariante $\nabla_X s|_p \equiv \nabla_{X_p} s$. Também definimos um mapa $\nabla : \Gamma(M, E) \rightarrow \Gamma(M, E) \otimes \Omega^1(M)$ por

$$\nabla s(X) \equiv \nabla_X s \quad X \in \mathfrak{X}(M) \quad s \in \Gamma(M, E). \quad (\text{A.178})$$

A.6.6 Expressão local para uma derivada covariante

Para aplicações em física, é necessário ter uma representação em coordenadas locais da derivada covariante. Sejam o fibrado principal $P(M, G)$ e um fibrado vetorial associado $E = P \times_\rho V$. Definimos uma seção local $\sigma_i \in \Gamma(U_i, P)$ e utilizamos a trivialização canônica $\sigma_i = \phi_i(p, e)$. Para $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ uma curva em U_i e seu levantamento horizontal $\tilde{\gamma}$, que é escrito como

$$\tilde{\gamma} = \sigma_i(t)g_i(t), \quad (\text{A.179})$$

onde $g_i(t) \equiv g_i(\gamma(t)) \in G$. Tomemos uma seção $e_\alpha(p) \equiv [(\sigma_i(p), e_\alpha^0)]$ de E , em que e_α^0 é o α -ésimo vetor de base de V , $(e_\alpha^0)^\beta = \delta_\alpha^\beta$. Temos

$$e_\alpha(t) = [(\tilde{\gamma}(t)g_i(t)^{-1}, (e_\alpha^0)^\beta)] \quad (\text{A.180})$$

Observe que $g_i(t)^{-1}$ atua em e_α^0 para compensar a mudança de base ao longo de γ . A derivada covariante de e_α é dada por

$$\begin{aligned}\nabla_X e_\alpha &= \left(\tilde{\gamma}(0), \frac{d}{dt} \{g_i(t)^{-1} e_\alpha^0\} \Big|_{t=0} \right) \\ &= \left(\tilde{\gamma}(0), g_i(0)^{-1} \left\{ \frac{d}{dt} g_i(t) \right\} g_i(0)^{-1} e_\alpha^0 \Big|_{t=0} \right) \\ &= (\tilde{\gamma}(0) g_i(0)^{-1}, \mathcal{A}_i(X) e_\alpha^0).\end{aligned}\tag{A.181}$$

onde usamos (A.148). De (A.181) encontramos a expressão local

$$\nabla_X e_\alpha = [(\sigma_i(0), \mathcal{A}_i(X) e_\alpha^0)].\tag{A.182}$$

Escrevendo \mathcal{A}_i em termos das componentes, temos $\mathcal{A}_i = \mathcal{A}_{i\mu} dx^\mu = \mathcal{A}_{i\mu}^\alpha e_\beta$, onde $\mathcal{A}_{i\mu}^\alpha \equiv \mathcal{A}_{i\mu}^\gamma (T_\gamma)^\alpha_\beta$. A segunda entrada de (A.182) é

$$\mathcal{A}_i(X) e_\alpha^0 = \frac{dx^\mu}{dt} e_\beta^0 \mathcal{A}_{i\mu}^\beta \delta_\alpha^\gamma = \frac{dx^\mu}{dt} \mathcal{A}_{i\mu}^\beta e_\beta^0.\tag{A.183}$$

Substituindo em (A.182), temos

$$\nabla_X e_\alpha = \left[\left(\sigma_i(0), \frac{dx^\mu}{dt} \mathcal{A}_{i\mu}^\beta e_\beta^0 \right) \right] = \frac{dx^\mu}{dt} \mathcal{A}_{i\mu}^\beta e_\beta.\tag{A.184}$$

ou

$$\nabla e_\alpha = \mathcal{A}_i^\beta e_\beta.\tag{A.185}$$

Em especial, para uma curva coordenada x^μ , temos

$$\nabla_{\partial/\partial x^\mu} e_\alpha = \mathcal{A}_{i\mu}^\beta e_\beta.\tag{A.186}$$

Por construção, a derivada covariante é independente da trivialização local. Também podemos observar essa independência através da forma local de $\nabla_X s$. Considere $\sigma_i(p)$ e $\sigma_j(p)$ seções locais em cartas sobrepostas U_i e U_j . Em $U_i \cap U_j$, temos que $\sigma_j(p) = \sigma_i(p) g_{ij}(p)$. Na i -ésima trivialização local, temos

$$\begin{aligned}\nabla_X s &= \left[\left(\sigma_i(0), \frac{d\xi_i}{dt} + \mathcal{A}_i(X) \xi_i \Big|_{t=0} \right) \right] \\ &= \left[\left(\sigma_i(0) g_{ij}^{-1}, \frac{d}{dt} (g_{ij} \xi_i) + \mathcal{A}_i(X) g_{ij} \xi_i \Big|_{t=0} \right) \right] \\ &= \left[\left(\sigma_j(0), \frac{d\xi_j}{dt} + \mathcal{A}_j(X) \xi_j \Big|_{t=0} \right) \right].\end{aligned}\tag{A.187}$$

onde usamos a condição (A.141). A última linha de (A.187) é $\nabla_X s$ expressa na j -ésima trivialização.

Exemplo A.6.1. *Vamos considerar o campo de calibre $U(1)$ acoplado a um campo escalar ϕ . Os fibrados envolvidos são $P(M, U(1))$ e o fibrado associado $E = P \times_\rho \mathbb{C}$, onde ρ é a identificação natural de um elemento de $U(1)$ com um número complexo. A expressão local da conexão ω é $\mathcal{A}_i = \mathcal{A}_{i\mu} dx^\mu$, onde $\mathcal{A}_i(\partial/\partial x^\mu)$ é o potencial vetor da eletrodinâmica de Maxwell. Seja γ uma curva em M com X o vetor tangente em $\gamma(0)$. Tomemos a seção local σ_i e escrevemos um levantamento horizontal $\tilde{\gamma}$ de γ como $\tilde{\gamma}(t) = \sigma_i(t)e^{i\varphi(t)}$. Se $1 \in \mathbb{C}$ é tomado como vetor base, a seção base é*

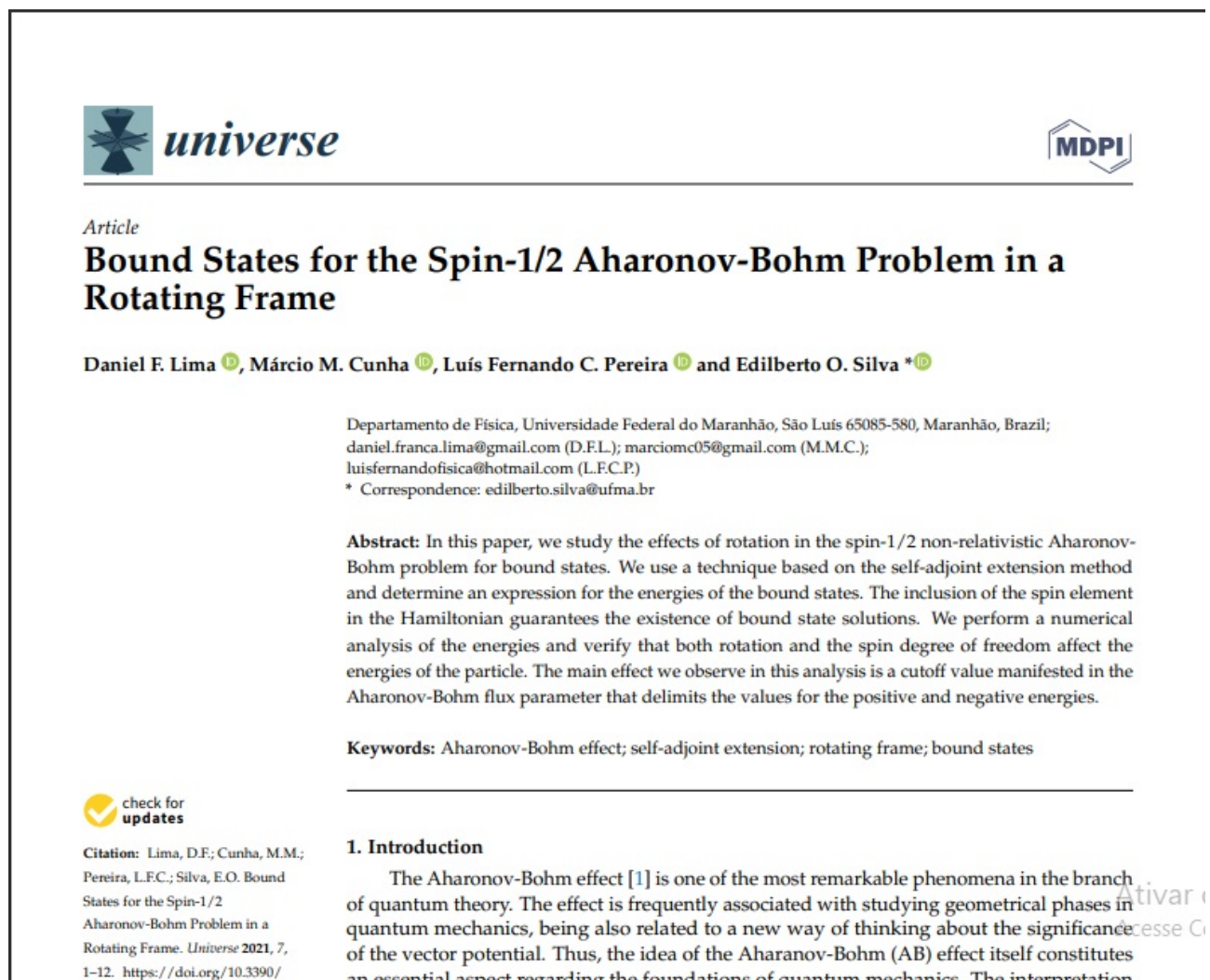
$$e = [(\sigma_i(p), 1)]. \quad (\text{A.188})$$

Seja $\phi(p) = [(\sigma_i(p), \Phi(p))] = \Phi(p)e$ ($\Phi : M \rightarrow \mathbb{C}$) uma seção de E , que é identificada com um campo escalar complexo. Com respeito a $\tilde{\gamma}(t)$, a seção é dada por

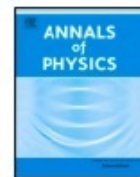
$$\phi(t) = \Phi(t)[(\tilde{\gamma}(t), U(t)^{-1})], \quad (\text{A.189})$$

onde $U(t) = e^{i\varphi(t)}$. A derivada covariante de ϕ ao longo de γ é

$$\begin{aligned} \nabla_X \phi &= \frac{d\Phi}{dt} [(\tilde{\gamma}(0), U(0)^{-1})] + \Phi(0) [(\tilde{\gamma}(0), U(0)^{-1} \mathcal{A}_i(X) \cdot 1)] \\ &= \left(\frac{d\Phi}{dt} + \mathcal{A}_{i\mu} \Phi \frac{dx^\mu}{dt} \right) e = X \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathcal{A}_{i\mu} \Phi \right) e. \end{aligned} \quad (\text{A.190})$$



121
 Figura B.1: Primeira página do artigo "Bound states for the spin-1/2 Aharonov-Bohm problem in a rotating frame."



Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum ring under rotating effects

Daniel F. Lima ^a, Frankbelson dos S. Azevedo ^a, Luís Fernando C. Pereira ^a,
Cleverson Filgueiras ^b, Edilberto O. Silva ^{a,*}

^a Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, Campus Universitário do Bacanga, 65085-580 São Luís, Maranhão, Brazil

^b Departamento de Física, Universidade Federal de Lavras, Caixa Postal 3037, 37200-000, Lavras, Minas Gerais, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:

Quantum ring
Rotating effect
Electronic states
Optical properties
Aharonov–Bohm flux

ABSTRACT

This work presents a theoretical study on the effects of rotation on the nonrelativistic quantum motion of a charged particle confined to a 2D ring in the presence of the Aharonov–Bohm effect and a uniform magnetic field. We formulate the Schrödinger equation with minimal coupling, incorporating the gauge field for the rotating frame and the potential vector of the electromagnetic field. By solving the equation of motion, we determine the eigenvalues and eigenfunctions of the particle. We analyze the probability distribution as a function of varying rotating parameter values and observe a perceptible shift in the distribution. This shift indicates a higher probability of locating the electron at the edges of the ring. The second part of our study focuses on the investigation of rotation effects on the linear and nonlinear optical properties of the system. Specifically, we examine the linear, nonlinear, and total refractive index changes, as well as the optical absorption coefficients. Through numerical analysis, we demonstrate significant rotating effects on energy levels and optical properties. Our findings indicate that, for the considered physical parameters, the impact of rotation on the optical properties becomes prominent at values on the order of a few terahertz.

1. Introduction

The behavior of Two-Dimensional Electron Gas (2DEG) in quantum rings at the mesoscopic scale, under the influence of specific types of confinement potential, Aharonov–Bohm potential, external magnetic fields, topological defects, and nonresonant intense

Ati
Ace

Figura B.2: Primeira página do artigo "Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum ring under rotating effects".

Referências Bibliográficas

- [1] A Fuhrer, S Lüscher, Thomas Ihn, Thomas Heinzl, Klaus Ensslin, Werner Wegscheider, and Max Bichler. Energy spectra of quantum rings. *Nature*, 413(6858):822, 2001.
- [2] Vladimir M Fomin. *Physics of quantum rings*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [3] Sumanta Bose, Weijun Fan, and Dao Hua Zhang. Optoelectronics of inverted type-i cds/cdse core/crown quantum ring. *Journal of Applied Physics*, 122(16), October 2017.
- [4] D.D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth. *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*. NanoScience and Technology. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [5] Péter Földi, Balázs Molnár, Mihály G. Benedict, and F. M. Peeters. Spintronic single-qubit gate based on a quantum ring with spin-orbit interaction. *Physical Review B*, 71(3), January 2005.
- [6] Péter Földi, Orsolya Kálmán, Mihály G. Benedict, and F. M. Peeters. Networks of quantum nanorings: Programmable spintronic devices. *Nano Letters*, 8(8):2556–2558, July 2008.
- [7] Péter Földi, Orsolya Kálmán, and F. M. Peeters. Stability of spintronic devices based on quantum ring networks. *Physical Review B*, 80(12), September 2009.
- [8] Elzbieta Zipper, Marcin Kurpas, Janusz Sadowski, and Maciej M. Maska. Semiconductor

- quantum ring as a solid-state spin qubit. *arXiv e-prints*, page arXiv:1011.2540, November 2010.
- [9] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115:485–491, Aug 1959.
- [10] L Dantas, C Furtado, and AL Silva Netto. Quantum ring in a rotating frame in the presence of a topological defect. *Physics Letters A*, 379(1-2):11–15, 2015.
- [11] Luís Fernando C Pereira, Márcio M Cunha, and Edilberto O Silva. 1d quantum ring: A toy model describing noninertial effects on electronic states, persistent current and magnetization. *Few-Body Systems*, 63(3):58, 2022.
- [12] Luís Fernando C. Pereira and Edilberto O. Silva. Modification of landau levels in a 2d ring due to rotation effects and edge states. *Annalen der Physik*, n/a(n/a):2200371, 2022.
- [13] Mahboubeh Omidi and Edris Faizabadi. Temperature-related behavior of the persistent current in a zigzag hexagonal graphene ring. *EPL (Europhysics Letters)*, 110(1):17005, 2015.
- [14] M. Peshkin and A. Tonomura, editors. *The Aharonov-Bohm Effect*. Springer-Verlag, 1989.
- [15] Y. Aharonov and A. Casher. Topological quantum effects for neutral particles. *Phys. Rev. Lett.*, 53:319–321, Jul 1984.
- [16] LH Ford and A Vilenkin. A gravitational analogue of the aharonov-bohm effect. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 14(9):2353, 1981.
- [17] M. Nouri-Zonoz and A. Parvizi. Gaussian curvature and global effects: Gravitational aharonov-bohm effect revisited. *Phys. Rev. D*, 88:023004, Jul 2013.
- [18] V. B. Bezerra. Gravitational analogs of the aharonov–bohm effect. *J. Math. Phys.*, 30(12):2895–2899, 1989.
- [19] H Davidowitz and V Steinberg. On an analog of the aharonov-bohm effect in superfluid helium. *Europhys. Lett. (Epl)*, 38(4):297–300, may 1997.

- [20] A Besharat, M Miri, and M Nouri-Zonoz. Optical aharonov–bohm effect due to toroidal moment inspired by general relativity. *J. Phys. Commun.*, 3(11):115019, 2019.
- [21] Enbang Li, Benjamin J Eggleton, Kejie Fang, and Shanhui Fan. Photonic aharonov–bohm effect in photon–phonon interactions. *Nature communications*, 5(1):1–5, 2014.
- [22] Tai Tsun Wu and Chen Ning Yang. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields. *Phys. Rev. D*, 12:3845–3857, Dec 1975.
- [23] Murray Peshkin. Aharonov-bohm effect in bound states: Theoretical and experimental status. *Phys. Rev. A*, 23:360–361, Jan 1981.
- [24] Jörg Schelter, Patrik Recher, and Björn Trauzettel. The aharonov–bohm effect in graphene rings. *Solid State Commun.*, 152(15):1411–1419, 2012. Exploring Graphene, Recent Research Advances.
- [25] P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo. Aharonov-bohm effect and broken valley degeneracy in graphene rings. *Phys. Rev. B*, 76:235404, Dec 2007.
- [26] Ryusuke Matsunaga, Kazunari Matsuda, and Yoshihiko Kanemitsu. Evidence for dark excitons in a single carbon nanotube due to the aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. Lett.*, 101:147404, Oct 2008.
- [27] C. R. Hagen. Aharonov-bohm scattering of particles with spin. *Phys. Rev. Lett.*, 64(5):503, jan 1990.
- [28] C. R. Hagen. Spin dependence of the aharonov-bohm effect. *Int. J. Mod. Phys. A*, 6:3119, 1991.
- [29] C. R. Hagen and D. K. Park. Relativistic aharonov-bohm-coulomb problem. *Ann. Phys. (Ny)*, 251(1):45, oct 1996.
- [30] D. K. Park and Jae Geun Oh. Self-adjoint extension approach to the spin-1/2 Aharonov-bohm-coulomb problem. *Phys. Rev. D*, 50(12):7715, dec 1994.

- [31] Vinicius Salem, Ramon F. Costa, Edilberto O. Silva, and Fabiano M. Andrade. Self-adjoint extension approach for singular hamiltonians in $(2 + 1)$ dimensions. *Front. Phys.*, 7:175, 2019.
- [32] W. G. Unruh. Notes on black-hole evaporation. *Phys. Rev. D*, 14:870–892, Aug 1976.
- [33] Chien-Hua Tsai and D Neilson. New quantum interference effect in rotating systems. *Physical Review A*, 37(2):619, 1988.
- [34] IC Fonseca and Knut Bakke. Rotating effects on an atom with a magnetic quadrupole moment confined to a quantum ring. *The European Physical Journal Plus*, 131:1–6, 2016.
- [35] R. Colella, A. W. Overhauser, and S. A. Werner. Observation of gravitationally induced quantum interference. *Phys. Rev. Lett.*, 34:1472–1474, Jun 1975.
- [36] S. A. Werner, J. L. Staudenmann, and R. Colella. Effect of earth’s rotation on the quantum mechanical phase of the neutron. *Phys. Rev. Lett.*, 42:1103–1106, Apr 1979.
- [37] Ulrich Bonse and Thomas Wroblewski. Measurement of neutron quantum interference in noninertial frames. *Phys. Rev. Lett.*, 51:1401–1404, Oct 1983.
- [38] Igor Pikovski, Magdalena Zych, Fabio Costa, and Caslav Brukner. Universal decoherence due to gravitational time dilation. *Nature Phys.*, 11:668–672, 2015.
- [39] Esteban Castro Ruiz, Flaminia Giacomini, and Časlav Brukner. Entanglement of quantum clocks through gravity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(12), March 2017.
- [40] Igor Pikovski, Magdalena Zych, Fabio Costa, and Caslav Brukner. Time dilation in quantum systems and decoherence: Questions and answers, 2015.
- [41] G. Rosi, G. D’Amico, L. Cacciapuoti, F. Sorrentino, M. Prevedelli, M. Zych, Č. Brukner, and G. M. Tino. Quantum test of the equivalence principle for atoms in coherent superposition of internal energy states. *Nature Communications*, 8(1), June 2017.
- [42] Flaminia Giacomini, Esteban Castro-Ruiz, and Časlav Brukner. Quantum mechanics and the covariance of physical laws in quantum reference frames. *Nature Communications*, 10(1), January 2019.

- [43] Alessio Belenchia, Robert M. Wald, Flaminia Giacomini, Esteban Castro-Ruiz, Časlav Brukner, and Markus Aspelmeyer. Information content of the gravitational field of a quantum superposition. *International Journal of Modern Physics D*, 28(14):1943001, October 2019.
- [44] Flaminia Giacomini and Časlav Brukner. Einstein’s equivalence principle for superpositions of gravitational fields and quantum reference frames, 2023.
- [45] Flaminia Giacomini and Časlav Brukner. Quantum superposition of spacetimes obeys einstein’s equivalence principle. *AVS Quantum Science*, 4(1), January 2022.
- [46] Yue Ma, Thomas Guff, Gavin W. Morley, Igor Pikovski, and M. S. Kim. Limits on inference of gravitational entanglement. *Physical Review Research*, 4(1), January 2022.
- [47] Thomas Guff, Nicolas Boulle, and Igor Pikovski. Optimal fidelity witnesses for gravitational entanglement. *Physical Review A*, 105(2), February 2022.
- [48] Vasileios Fragkos, Michael Kopp, and Igor Pikovski. On inference of quantization from gravitationally induced entanglement. *AVS Quantum Science*, 4(4), November 2022.
- [49] Onur Pusuluk, Zafer Gedik, and Vlatko Vedral. Witnessing superpositions of causal orders by weak measurements at a given time, 2022.
- [50] Chiara Marletto and Vlatko Vedral. Interference in quantum field theory: detecting ghosts with phases, 2022.
- [51] Tianfeng Feng and Vlatko Vedral. Amplification of gravitationally induced entanglement. *Physical Review D*, 106(6), September 2022.
- [52] Igor Pikovski, Magdalena Zych, Fabio Costa, and Časlav Brukner. Universal decoherence due to gravitational time dilation. *Nature Physics*, 11(8):668–672, June 2015.
- [53] R.W. Boyd and D. Prato. *Nonlinear Optics*. Elsevier Science, 2008.
- [54] Y.R. Shen. *The Principles of Nonlinear Optics*. Wiley classics library. Wiley, 2003.
- [55] A.M. Fox. *Optical Properties of Solids*. Oxford master series in condensed matter physics. Oxford University Press, 2001.

- [56] Y.V.G.S. Murti and C. Vijayan. *Essentials of Nonlinear Optics*. ANE/Athena Books. Wiley, 2014.
- [57] N. Bloembergen. *Nonlinear Optics*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series. World Scientific, 1996.
- [58] M Jaouane, A Sali, A Fakkahi, R Arraoui, and FATİH Ungan. The effects of temperature and pressure on the optical properties of a donor impurity in (in, ga) n/gan multilayer cylindrical quantum dots. *Micro and Nanostructures*, 163:107146, 2022.
- [59] Yiming Duan, Xuechao Li, Ceng Chang, and Zhuang Zhao. Calculation of linear and non-linear optical properties of spherical quantum dots with hulthén plus hellmann confining potential. *Optik*, 261:169187, 2022.
- [60] Shalini Lumb Talwar, Sonia Lumb, and Vinod Prasad. Optical properties of hydrogenic impurity in a distorted quantum disk. *The European Physical Journal Plus*, 137(2):175, 2022.
- [61] Peter Michler. *Single quantum dots: Fundamentals, applications and new concepts*, volume 90. Springer Science & Business Media, 2003.
- [62] D.J. Griffiths. *Eletrodinâmica*. Pearson Universidades, 2010.
- [63] Y. Aharonov and D. Rohrlich. *Quantum Paradoxes: Quantum Theory for the Perplexed*. Physics textbook. Wiley, 2008.
- [64] D.A. Bromley and W. Greiner. *Quantum Mechanics: Special Chapters*. Theoretical physics. Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [65] J.J. Sakurai. *Advanced Quantum Mechanics*. Addison-Wesley series in advanced physics. Addison-Wesley Longman, 1999.
- [66] L.H. Ryder. *Quantum Field Theory*. Quantum Field Theory. Cambridge University Press, 1996.
- [67] W. H. Furry and N. F. Ramsey. Significance of potentials in quantum theory. *Phys. Rev.*, 118:623–626, May 1960.

- [68] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115:485–491, Aug 1959.
- [69] Lindsay J Tassie and Murray Peshkin. Symmetry theory of the aharonov-bohm effect: Quantum mechanics in a multiply connected region. *Annals of Physics*, 16(2):177–184, 1961.
- [70] Y. Aharonov and D. Bohm. Further considerations on electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 123:1511–1524, Aug 1961.
- [71] B. Liebowitz. Significance of the Aharonov-Bohm effect. *Nuovo Cimento Serie*, 38(2):932–950, July 1965.
- [72] Timothy H. Boyer. Classical electromagnetic interaction of a charged particle with a constant-current solenoid. *Phys. Rev. D*, 8:1667–1679, Sep 1973.
- [73] P. Bocchieri and Angelo Loinger. Nonexistence of the aharonov-bohm effect. *Il Nuovo Cimento A (1965-1970)*, 47:475–482, 1978.
- [74] S. M. Roy. Condition for nonexistence of aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. Lett.*, 44:111–114, Jan 1980.
- [75] Murray Peshkin. The aharonov-bohm effect: Why it cannot be eliminated from quantum mechanics. *Physics Reports*, 80(6):375–386, 1981.
- [76] Daniel M. Greenberger. Reality and significance of the aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. D*, 23:1460–1462, Mar 1981.
- [77] S. Olariu and I. Iovitzu Popescu. The quantum effects of electromagnetic fluxes. *Rev. Mod. Phys.*, 57:339–436, Apr 1985.
- [78] Allan Walstad. A critical reexamination of the electrostatic aharonov-bohm effect. *International Journal of Theoretical Physics*, 49(11):2929–2934, September 2010.
- [79] Lev Vaidman. Role of potentials in the aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. A*, 86:040101, Oct 2012.
- [80] Pablo L. Saldanha. Gauge invariance of the aharonov-bohm effect in a quantum electrodynamics framework. *Phys. Rev. A*, 109:062205, Jun 2024.

- [81] Pablo L. Saldanha. Electrodynamic Aharonov-Bohm effect. , 108(6):062218, December 2023.
- [82] Pablo L. Saldanha. Aharonov-casher and shielded aharonov-bohm effects with a quantum electromagnetic field. *Phys. Rev. A*, 104:032219, Sep 2021.
- [83] Pablo L. Saldanha. Local description of the aharonov–bohm effect with a quantum electromagnetic field. *Foundations of Physics*, 51(1):6, Feb 2021.
- [84] Robert B Leighton and Matthew Sands. *The Feynman lectures on physics*, volume 2. Addison-Wesley Boston, MA, USA, 1965.
- [85] C. N. Yang and R. L. Mills. Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance. *Phys. Rev.*, 96:191–195, Oct 1954.
- [86] Ryoyu Utiyama. Invariant theoretical interpretation of interaction. *Phys. Rev.*, 101:1597–1607, Mar 1956.
- [87] Tai Tsun Wu and Chen Ning Yang. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields. *Phys. Rev. D*, 12(12):3845, 1975.
- [88] Bryce S. DeWitt. Quantum theory without electromagnetic potentials. *Phys. Rev.*, 125:2189–2191, Mar 1962.
- [89] Yakir Aharonov, Eliahu Cohen, and Daniel Rohrlich. Nonlocality of the aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. A*, 93:042110, Apr 2016.
- [90] R. G. Chambers. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Phys. Rev. Lett.*, 5:3–5, Jul 1960.
- [91] H. A. Fowler, L. Marton, J. Arol Simpson, and J. A. Suddeth. Electron Interferometer Studies of Iron Whiskers. *Journal of Applied Physics*, 32(6):1153–1155, 06 1961.
- [92] H. Boersch, H. Hamisch, and K. Grohmann. Experimenteller nachweis der phasenverschiebung von elektronenwellen durch das magnetische vektorpotential. ii. *Zeitschrift für Physik*, 169(2):263–272, 6 1962.

- [93] G. Möllenstedt and W. Bayh. Messung der kontinuierlichen Phasenschiebung von Elektronenwellen im kraftfeldfreien Raum durch das magnetische vektorpotential einer Luftspule. *Naturwissenschaften*, 49(4):81–82, January 1962.
- [94] Akira Tonomura, Tsuyoshi Matsuda, Ryo Suzuki, Akira Fukuhara, Nobuyuki Osakabe, Hiroshi Umezaki, Junji Endo, Kohsei Shinagawa, Yutaka Sugita, and Hideo Fujiwara. Observation of aharonov-bohm effect by electron holography. *Phys. Rev. Lett.*, 48(21):1443, 1982.
- [95] Akira Tonomura, Nobuyuki Osakabe, Tsuyoshi Matsuda, Takeshi Kawasaki, Junji Endo, Shinichiro Yano, and Hiroji Yamada. Evidence for aharonov-bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave. *Phys. Rev. Lett.*, 56:792–795, Feb 1986.
- [96] Murray Peshkin. The aharonov-bohm effect part one: Theory. In *The Aharonov-Bohm Effect*, pages 1–34. Springer, 1989.
- [97] S.T. Thornton and J.B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Brooks/Cole, 2004.
- [98] G.R. Fowles and G.L. Cassiday. *Analytical Mechanics*. Analytical Mechanics. Thomson Brooks/Cole, 2005.
- [99] D. Morin. *Introduction to Classical Mechanics: With Problems and Solutions*. Cambridge University Press, 2008.
- [100] L. Ryder. *Introduction to General Relativity*. Cambridge University Press, 2020.
- [101] Jun John Sakurai, Jim Napolitano, et al. *Modern quantum mechanics*, volume 185. Pearson Harlow, 2014.
- [102] Friedrich W. Hehl and Wei-Tou Ni. Inertial effects of a Dirac particle. *Phys. Rev. D*, 42:2045–2048, 1990.
- [103] D. Singh and G. Papini. Spin 1/2 particles in noninertial reference frames: Low-energy and high-energy approximations. *Nuovo Cim. B*, 115:223, 2000.
- [104] Mamoru Matsuo, Jun’ichi Ieda, Eiji Saitoh, and Sadamichi Maekawa. Spin-dependent inertial force and spin current in accelerating systems. *Phys. Rev. B*, 84:104410, Sep 2011.

- [105] Leslie L. Foldy and Siegfried A. Wouthuysen. On the dirac theory of spin $1/2$ particles and its non-relativistic limit. *Phys. Rev.*, 78:29–36, Apr 1950.
- [106] Smio Tani. Connection between Particle Models and Field Theories, I: The Case Spin $1/2$. *Prog. Theor. Phys.*, 6(3):267–285, 06 1951.
- [107] James D Bjorken and Sidney D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, 1998.
- [108] Guido Rizzi and Matteo Luca Ruggiero, editors. *Relativity in Rotating Frames*. Springer Netherlands, 2004.
- [109] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [110] Daniel F. Lima, Márcio M. Cunha, Luís Fernando C. Pereira, and Edilberto O. Silva. Bound states for the spin- $1/2$ aharonov-bohm problem in a rotating frame. *Universe*, 7(12), 2021.
- [111] F. M. Andrade, E. O. Silva, and M. Pereira. Physical regularization for the spin- $1/2$ Aharonov-bohm problem in conical space. *Phys. Rev. D*, 85(4):041701(R), February 2012.
- [112] F. M. Andrade, E. O. Silva, and M. Pereira. On the spin- $1/2$ Aharonov-bohm problem in conical space: Bound states, scattering and helicity nonconservation. *Ann. Phys. (NY)*, 339(0):510–530, dec 2013.
- [113] R. Casana, M. M. Ferreira, E. Passos, F. E. P. dos Santos, and E. O. Silva. New *cpt*-even and lorentz-violating nonminimal coupling in the dirac equation. *Phys. Rev. D*, 87:047701, Feb 2013.
- [114] Ph. de Sousa Gerbert. Fermions in an aharonov-bohm field and cosmic strings. *Phys. Rev. D*, 40(4):1346, aug 1989.
- [115] Ph. de Sousa Gerbert and R. Jackiw. Classical and quantum scattering on a spinning cone. *Commun. Math. Phys.*, 124:229, 1989.

- [116] R.W. Jackiw. *Diverse topics in theoretical and mathematical physics*. Advanced Series in Mathematical Physics. World Scientific, Singapore, 1995.
- [117] S.A. Voropaev, D.V. Galtsov, and D.A. Spasov. Bound states for fermions in the gauge aharonov-bohm field. *Phys. Lett. B*, 267(1):91–94, sep 1991.
- [118] M. Bordag and S. Voropaev. Bound states of an electron in the field of the magnetic string. *Phys. Lett. B*, 333(1–2):238–244, jul 1994.
- [119] M Bordag and S Voropaev. Charged particle with magnetic moment in the aharonov-bohm potential. *J. Phys. A*, 26(24):7637–, 1993.
- [120] D. K. Park. Green’s-function approach to two- and three-dimensional delta-function potentials and application to the spin-1/2 aharonov-bohm problem. *J. Math. Phys.*, 36(10):5453, 1995.
- [121] C. Filgueiras and F. Moraes. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. *Ann. Phys. (Ny)*, 323(12):3150–3157, dec 2008.
- [122] C. Filgueiras, E. O. Silva, W. Oliveira, and F. Moraes. The effect of singular potentials on the harmonic oscillator. *Ann. Phys. (Ny)*, 325(11):2529, 2010.
- [123] F. Gesztesy, S. Albeverio, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden. Point interactions in two dimensions: Basic properties, approximations and applications to solid state physics. *J. Reine Angew. Math.*, 380(380):87, jan 1987.
- [124] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, second edition, 2004.
- [125] E. O. Silva, F. M. Andrade, C. Filgueiras, and H. Belich. On aharonov-casher bound states. *Eur. Phys. J. C*, 73(4):2402, 2013.
- [126] Edilberto O. Silva. On planar quantum dynamics of a magnetic dipole moment in the presence of electric and magnetic fields. *Eur. Phys. J. C*, 74(10):3112, 2014.
- [127] Fabiano M. Andrade, Cleverson Filgueiras, and Edilberto O. Silva. Scattering and bound states of a spin-1/2 neutral particle in the cosmic string spacetime. *Adv. High Energy Phys.*, 2017:7, 2017.

- [128] Edilberto O. Silva, Sérgio C. Ulhoa, Fabiano M. Andrade, Cleverson Filgueiras, and R. G. G. Amorin. Quantum motion of a point particle in the presence of the aharonov–bohm potential in curved space. *Ann. Phys. (Ny)*, 362:739, 2015.
- [129] Guy Bonneau, Jacques Faraut, and Galliano Valent. Selfadjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 69:322, 2001.
- [130] M. Reed and B. Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press, New York - London, 1975.
- [131] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series. World Scientific, 1998.
- [132] Bernard S. Kay and Urban M. Studer. Boundary conditions for quantum mechanics on cones and fields around cosmic strings. *Commun. Math. Phys.*, 139(1):103, 1991.
- [133] F. M. Andrade, E. O. Silva, and M. Pereira. On the spin- 1/2 Aharonov-bohm problem in conical space: Bound states, scattering and helicity nonconservation. *Ann. Phys. (Ny)*, 339(0):510–530, 2013.
- [134] C. Filgueiras, E. O. Silva, and F. M. Andrade. Nonrelativistic quantum dynamics on a cone with and without a constraining potential. *J. Math. Phys.*, 53(12):122106, 2012.
- [135] C. R. Hagen. Exact equivalence of spin-1/2 Aharonov-bohm and aharonov-casher effects. *Phys. Rev. Lett.*, 64(20):2347–2349, 1990.
- [136] C. R. Hagen. Effects of nongauge potentials on the spin-1/2 Aharonov-bohm problem. *Phys. Rev. D*, 48(12):5935, 1993.
- [137] Petr Král and H. R. Sadeghpour. Laser spinning of nanotubes: A path to fast-rotating microdevices. *Phys. Rev. B*, 65:161401, Mar 2002.
- [138] Alexey M. Bubenchikov, Mikhail A. Bubenchikov, Dmitriy V. Mamontov, and Alexandr V. Lun-Fu. Md-simulation of fullerene rotations in molecular crystal fullerite. *Crystals*, 9(10), 2019.
- [139] P.N. Butcher and D. Cotter. *The Elements of Nonlinear Optics*. Cambridge Studies in Modern Optics. Cambridge University Press, 1990.

- [140] Thiago Dantas do Nascimento. Não-linearidade óptica de terceira ordem de líquidos orgânicos e coloides com nanobastões de ouro. Master's thesis, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Brasil, 2023.
- [141] Gabriel Teixeira Landi. Quantum information and quantum noise. PDF, 218. <http://www.fmt.if.usp.br/gtlandi/lecture-notes-2.pdf>.
- [142] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications*. Wiley, 2019.
- [143] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, USA, revised edition, 1994.
- [144] M. A. Nielsen and I. I. Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge Univ. Press, 2000.
- [145] Doyeol Ahn and Shun-lien Chuang. Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 23(12):2196–2204, 1987.
- [146] Lionel A. Truffandier, Rivo M. Dianzinga, and David R. Bowler. Notes on density matrix perturbation theory. *The Journal of Chemical Physics*, 153(16):164105, 10 2020.
- [147] Carlos Mario Duque Jiménez. Quantum disc plus inverse square potential. an analytical model for two-dimensional quantum rings: Study of nonlinear optical properties. Master's thesis, Universidad de Antioquia, Medellin, Colombia, 2012.
- [148] Daniel F. Lima, Frankbelson dos S. Azevedo, Luís Fernando C. Pereira, Cleverson Filgueiras, and Edilberto O. Silva. Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum ring under rotating effects. *Annals of Physics*, 459:169547, 2023.
- [149] W.-C. Tan and J. C. Inkson. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. *Phys. Rev. B*, 60:5626–5635, Aug 1999.
- [150] D. V. Bulaev, V. A. Geyler, and V. A. Margulis. Effect of surface curvature on magnetic moment and persistent currents in two-dimensional quantum rings and dots. *Phys. Rev. B*, 69:195313, May 2004.

- [151] Carlos M Duque, Miguel E Mora-Ramos, and Carlos A Duque. Quantum disc plus inverse square potential. an analytical model for two-dimensional quantum rings: Study of nonlinear optical properties. *Annalen der Physik*, 524(6-7):327–337, 2012.
- [152] Shuai Shao, Kang-Xian Guo, Zhi-Hai Zhang, Ning Li, and Chao Peng. Third-harmonic generation in cylindrical quantum dots in a static magnetic field. *Solid State Communications*, 151(4):289–292, 2011.
- [153] Shijun Liang, Wenfang Xie, and Huaya Shen. Optical properties in a two-dimensional quantum ring: confinement potential and aharonov–bohm effect. *Optics Communications*, 284(24):5818–5828, 2011.
- [154] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, second edition, 2005.
- [155] Jian-Hui Yuan, Li-Li Wang, Zheng-Ye Xiong, Ni Chen, Zhi-Hai Zhang, and Yong-Xiang Zhao. Hydrogenic impurity effect on the optical nonlinear absorption properties of spherical quantum dots with a parabolic potential. *The European Physical Journal Plus*, 133(10):395, 2018.
- [156] M. NAKAHARA. *Geometry, Topology and Physics*. Graduate Student Series in Physics. INST OF PHYSICS PUB, 1999.
- [157] Andres Collinucci and Alexander Wijns. *Topology of fibre bundles and global aspects of gauge theories*, 2006.
- [158] R.A. Bertlmann. *Anomalies in Quantum Field Theory*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2000.
- [159] F.P.Schuller. The geometrical anatomy of theoretical physics. https://www.youtube.com/watch?v=V49i_LM8BOE&list=PLPH7f_7ZlzxTi6kS4vCmv4ZKm9u8g5yic&ab_channel=FredericSchuller, 2015. Accessed 22/09/23.
- [160] Simon Rea. The geometrical anatomy of theoretical physics. <http://mathswithphysics.blogspot.com/2016/07/lectures-on-geometric-anatomy-of.html>, 2015.
- [161] C.J. Isham. *Modern Differential Geometry for Physicists*. World Scientific lecture notes in physics. Allied Publ., 2002.

- [162] E. Keski-Vakkuri, C. Montonen, and M. Panero. *Mathematical Methods for Physics: An Introduction to Group Theory, Topology and Geometry*. Cambridge University Press, 2022.
- [163] Y. Choquet-Bruhat, C. DeWitt-Morette, and M. Dillard-Bleick. *Analysis, Manifolds and Physics Revised Edition*. Analysis, Manifolds and Physics. Elsevier Science, 1982.
- [164] K.S. Lam. *Topics In Contemporary Mathematical Physics (Second Edition)*. World Scientific Publishing Company, 2015.
- [165] A.S.T. Pires. *Geometria Diferencial Para Fisicos*. LIVRARIA DA FISICA, 1 edition, 2015.
- [166] A.S.T. Pires. *A Brief Introduction to Topology and Differential Geometry in Condensed Matter Physics*. IOP Concise Physics. Morgan & Claypool Publishers, 2019.
- [167] C. Nash and S. Sen. *Topology and Geometry for Physicists*. Elsevier Science, 1988.
- [168] B.F. Schutz. *Geometrical Methods of Mathematical Physics*. Cambridge University Press, 1980.
- [169] A. Marsh. *Mathematics For Physics: An Illustrated Handbook*. World Scientific Publishing Company, 2017.
- [170] T. Eguchi, P.B. Gilkey, and A.J. Hanson. *Gravitation, Gauge Theories and Differential Geometry*. Physics reports. North-Holland Publishing, 1980.
- [171] M. Fecko. *Differential Geometry and Lie Groups for Physicists*. Cambridge University Press, 2006.
- [172] G. Rudolph and M. Schmidt. *Differential Geometry and Mathematical Physics: Part I. Manifolds, Lie Groups and Hamiltonian Systems*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Netherlands, 2014.
- [173] G. Rudolph and M. Schmidt. *Differential Geometry and Mathematical Physics: Part II. Fibre Bundles, Topology and Gauge Fields*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Netherlands, 2017.

- [174] H. Eschrig. *Topology and Geometry for Physics*. Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [175] S. Kobayashi and K. Nomizu. *Foundations of Differential Geometry*. Number v. 1 in Foundations of Differential Geometry. Interscience Publishers, 1963.
- [176] W.D. Curtis and F.R. Miller. *Differential Manifolds and Theoretical Physics*. ISSN. Elsevier Science, 1985.