UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº17.228 de 25/11/2016
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS
SEMANA NACIONAL DE CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA - 2019

ANÁLISE DE UM ANEL DE GRAFENO

Bassem Youssef Makhoul Junior[1]; Carlos Alberto de Lima Ribeiro[2]

1. Bolsista PIBIC/CNPq, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: bassem_ymj@hotmail.com

2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: calr@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Anéis de Grafeno; Potencial confinador; Equação de Dirac.

INTRODUÇÃO

Partículas confinadas em anéis quânticos bidimensionais tem chamado muita atenção da comunidade científica pelo número de possíveis aplicações desses sistemas físicos. Quando anéis mesoscópicos estão em presença de um campo externo é possível observar uma serie de fenômenos, tais como: o efeito Aharonov-Bohm, o efeito Hall quântico e a fase quântica de Berry. Este trabalho consiste em um estudo sobre sistemas mesoscópicos, em especifico os anéis de grafeno. foram feitos estudos sobre artigos que trabalhavam com sistemas do tipo anel sob efeito do potencial confinador de Tan-Inkson, para que entendêssemos essa modelagem de potenciais bidimensionais. Este trabalho consiste em um estudo sobre sistemas mesoscópicos, em especifico os anéis de grafeno, sendo o principal objetivo deste, ter uma ideia de como um potencial confinador atua num sistema físico e de qual forma resolvê-lo.

METODOLOGIA

Utilizamos em nossa pesquisa a pesquisa quantitativa e qualitativa. Por meio do Método Analítico deduzimos equações e soluções. Começamos com a dedução e o significado da equação de Dirac, visando entender a razão pela qual a equação de Schrödinger não era mais válida. Após isto, estudamos o efeito de um potencial confinante do tipo Tan-Inkson para o estudo de uma partícula neutra com momento de dipolo em presença de um anel quântico como meio.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Um dos maiores problemas com a equação de Schrödinger é que ela não se mantinha invariante sob as transformações de Lorentz, ou seja, era impossível descrever partículas relativísticas com ela. Em 1928, Paul Dirac propôs uma equação que conseguia descrever com sucesso partículas de spin meio, como o elétron (SHANKAR, 1994)..

Uma das tentativas de encontrar uma equação relativística, era partindo da energia relativística

$$E^2 = H^2 = c^2p^2 + m^2c^4, \tag{01}$$

sabemos que o operador hamiltoniano que representa a energia pode ser escrito da seguinte forma

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \tag{02}$$

Para este sistema, iremos usar $\hbar = c = 1$. Aplicando a equação (01) na equação (02)

$$E^2\psi = i^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = (p^2 + m^2)\psi,$$

após algumas manipulações matemáticas

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 - m^2\right)\psi = 0. \tag{03}$$

A equação (03) é dita de Klein-Gordon.

Porém, ela apresenta um problema, quando se calcula a densidade de probabilidade, obtemos tanto valores positivos quanto negativos, mas sabemos que não existe densidade de probabilidade negativa.

Para encontrarmos a equação de Dirac partiremos novamente da energia relativística

$$E^2 - p^2 - m^2 = 0, \tag{04}$$

A qual pode ser reescrita como

$$p_\mu p^\mu - m^2 = 0. \tag{05}$$

Paul Dirac tentou escrever a equação acima da seguinte forma:

$$p_\mu p^\mu - m^2 = \left(\beta^k p_k + m\right)(\gamma^\alpha p_\alpha - m), \tag{06}$$

Na qual os índices k e α variam de zero a três.

Expandindo o termo da direita, obteremos:

$$\left(\beta^k p_k + m\right)(\gamma^\alpha p_\alpha - m) = \left(\beta^k p_k \gamma^\alpha p_\alpha - m^2 - m\beta^k p_k + m\gamma^\alpha p_\alpha\right),$$

esta quantidade deverá ser igual a $p_\mu p^\mu - m^2$, então precisaremos evitar os termos que acompanham a massa. Uma solução seria fazer $\beta^k = \gamma^\alpha$, e dessa forma:

$$p_\mu p^\mu - m^2 = \gamma^k\gamma^\alpha p_k p_\alpha - m^2, \tag{07}$$

Substituindo os valores para k e α de zero a três, e usando as propriedades da álgebra de Clifford, chegaremos no seguinte resultado

$$\left(\gamma^k p_k + m\right)(\gamma^\alpha p_\alpha - m) = 0, \tag{08}$$

a equação de Dirac pode ser qualquer dos dois fatores, por conveniência adotou-se o primeiro:

$$\left(\gamma^k p_k - m\right)\psi = 0, \tag{09}$$

poderemos expressar o momento na sua forma de operador, a equação (07) fica da seguinte forma

$$\left(i\gamma^k\partial_k - m\right)\psi = 0. \tag{10}$$

A equação (10) é conhecida como equação de Dirac.

Iremos agora encontrar o hamiltoniano para uma partícula livre, usando a solução a equação (10) e uma solução já encontrada, assim teremos:

$$\left(i\gamma^k\partial_k - m\right)Ne^{-i\,(Et - px)} = 0,$$

$$\left[\gamma^k(E - p) - m\right] = 0,$$

Multiplicaremos topos os termos por γ^0

$$[\gamma^0\gamma^0 E - \gamma^0\gamma p - \gamma^0 m] = 0,$$

Sendo $\gamma^0\gamma^0 = 1$, e chamando $\gamma^0\gamma = \alpha$ e $\gamma^0 = \beta$, teremos

$$E = \alpha p + \beta m. \tag{11}$$

Usando as seguintes transformações para se obter uma solução mais geral, teremos

$$E \to E - e\Phi, \tag{12}$$

$$p \to p - eA, \tag{13}$$

e o hamiltoniano será:

$$H = \alpha p + \beta m + e\Phi. \tag{14}$$

Agora iremos tratar da análise do potencial. Nessa abordagem, o nosso objetivo é descrever a dinâmica de uma partícula neutra com dipolo induzido confinado em um anel quântico, em duas configurações de campo elétrico e magnético. É introduzido um potencial confinador, que é chamado Potencial de Tahn-Inkson. O potencial tem a seguinte forma:

$$V_{ti} = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \tag{15}$$

Após uma analise do sistema físico, chegamos no seguinte Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} + \alpha(\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}))^2 - \frac{1}{2}\alpha\boldsymbol{E} + V_{ti}. \tag{16}$$

Pela equação de Schrödinger temos que

$$\widehat{H}\psi = E\,\psi, \tag{17}$$

Ou seja, nosso problema agora é resolver a equação diferencial para encontrarmos os autovalores e autovetores. Realizaremos manipulações matemáticas, e chegaremos à seguinte equação:

$$\tau\,\frac{d^2\sigma}{d\tau^2} + \frac{d\sigma}{d\tau}(|L| + 1 - \tau) + \left[\frac{|L| + 1}{2} - \beta\right]\sigma = 0, \tag{18}$$

ela é similar a uma equação hipergeométrica, portanto teremos como solução

$$\sigma(\tau) = F\left[-\left(-\frac{|L| + 1}{2} + \beta\right), |L| + 1, \tau\right], \tag{19}$$

a equação (19) deve obedecer ao requisito de convergência para a função hipergeométrica, logo, o primeiro parâmetro deve ser um inteiro negativo, assim ficaremos com

$$-\left(-\frac{|L| + 1}{2} + \beta\right) = -n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{20}$$

a energia será então

$$E_{n,l} = \left(n + \frac{|L|}{2} + \frac{1}{2}\right) w_0 - \frac{m}{4} w_0^2 r_0^2, \tag{21}$$

as autofunções serão

$$\psi_{n,l}(r,\phi) = \frac{1}{\lambda_0^{|L|+1}}\left[\frac{\Gamma(n + |L| + 1)}{2^{|L|} n!\,\Gamma(|L| + 1)^2 \pi}\right]^{1/2} e^{iL\phi} r^{|L|} \times \exp\left(\frac{r^2}{4\lambda_0}\right) F\left[-n; |L| + 1, \frac{r^2}{2\lambda_0^2}\right] \tag{22}$$

Em seguida passaremos a estudar um anel quântico sob rotação em presença de um defeito topológico do tipo parafuso. Iremos usar o mesmo Potencial de Tan-Inkson na presença de um campo magnético constante e do fluxo de Aharonov-Bohm.

O Hamiltoniano será expresso por:

$$H = \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A} - \mu\Omega \times \boldsymbol{r})^2 - \frac{1}{2}\mu(\Omega \times \boldsymbol{r})^2, \tag{23}$$

a equação de Schrodinger acima, pela abordagem anterior, levará-nos à seguinte expressão:

$$\tau\,\frac{d^2\sigma}{d\tau^2} + \frac{d\sigma}{d\tau}(|L| + 1 - \tau) + \left[\frac{|L| + 1}{2} - \beta\right]\sigma = 0, \tag{24}$$

então os autovalores de energia e seus autovetores serão dados respectivamente por:

$$E_{n,l} = \left(n + \frac{|L\,|}{2} + \frac{1}{2}\right)\hbar w - \frac{1}{2}(m - \beta k - l)\hbar w^* + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - \frac{\mu}{4} w_0^2 r_0^2, \tag{25}$$

e

$$\psi_{n,mk}(\rho,\phi,z) = \left(\frac{1}{\lambda_0}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{\Gamma(n+|L|+1)}{2^{|L|+1}n!\Gamma(|\mathrm{L}|+1)^2\pi}\right]^{1/2} e^{im\phi}e^{ikz}\rho^{|L|} \times \exp\left(-\frac{\rho^2}{4\lambda_0}\right)F\left[-n;|L|+1,\frac{\rho^2}{2\lambda_0^2}\right]. \quad (26)$$

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Assim sendo, neste trabalho conseguimos descrever a dinâmica de uma partícula neutra com dipolo induzido confinada em um anel quântico, em duas configurações de campo elétrico e magnético sujeita a dois regimes, em ambos os casos estão sob um potencial confinador de Tan-Inkson. Determinamos por meio de uma análise analítica os autovalores de energia e autovetores que descrevem essas situações físicas. Estudamos a equação de Dirac que diferente da equação de Schrodinger, consegue descrever partículas relativísticas. O intuito final deste trabalho era descrever o comportamento dessa partícula neutra portadora de dipolo em um anel quântico de grafeno sob o potencial de Tahn-Inkson, através de uma abordagem via equação de Dirac. Entretanto, interrompemos a pesquisa para a realização de um intercâmbio em Portugal. Apesar do pouco tempo que tivemos, conseguimos obter muitos resultados relevantes. A expressão da enrgia obtida mostra a sua relação com fatores presentes no Potencial de Tan-Inkson

REFERÊNCIAS

DANTAS, L, FURTADO; C., SILVA NETTO; A.L., *Quantum ring in a rotating frame in te presence of a topological defect; Physics Letters A* 379,p. 11-15, 2015

DANTAS; L., FURTADO, C., *Induced electric dipole in a quantum ring. Physics Letters A* 377, p. 2926-2930, 2013.

GRIFFITHS; D., Mecânica Quântica, 2° edição, PEARSON: São Paulo, 2011.

SAKURAI; J.J., NAPOLITANO; J. Mecânica Quântica Moderna; 2° edição Bookman: Porto Alegre, 2013.

SHANKAR, R., *Principles of Quantum Mechanics, New Haven Connecticut, Yale university, Plenum Publishers*, 1994.