



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Efeitos da massa efetiva variável, e do campo magnético no
transporte eletrônico em nanotubos deformados.

Felipe Assis Costa Serafim

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

14 de janeiro de 2019

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Felipe Assis Costa Serafim

**Efeitos da massa efetiva variável, e do campo magnético no
transporte eletrônico em nanotubos deformados.**

Trabalho submetido ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes

**Recife - PE
14 de janeiro de 2019**

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Efeitos da massa efetiva variável, e do campo magnético no transporte
eletrônico em nanotubos deformados.**

Felipe Assis Costa Serafim

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 25/07/2018 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
UFRPE

Banca Examinadora:

Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
UFRPE

Dr. Fernando Antonio Nóbrega Santos
UFPE

Dedico esta, bem como todas as minhas demais conquistas, à Deus, a todos os meus professores, amigos e familiares.

Agradecimentos

Gostaria primeiramente agradecer à Deus e aos meus familiares que sempre demonstraram um apoio incondicional nos desafios por mim vividos, não só nesse momento, mas em toda a minha vida. Uma pessoa importante nessa caminhada foi minha namorada, Milena Martins, junto com sua família, sempre me deram o incentivo para me manter focado e determinado nos meus objetivos, e a qual é um grande exemplo de dedicação. Outro grande pilar desse trabalho se deve ao professor Fernando Moraes, que desde o primeiro dia de orientação sempre se mostrou disposto a me ajudar, e ajudou muito. Aprendi muito com Fernando, sendo no aspecto científico, tanto no pessoal, com sua humildade e dedicação. Também gostaria de registrar meu agradecimento aos professores Fernando Santos (UFPE), Jonas Romero, Erms Pereira, que contribuíram de alguma forma na minha formação. Não posso de deixar de agradecer aos amigos que fiz durante minha boa e longa estadia na UFRPE, sem eles as coisas seriam bem mais difíceis, sem as discussões sobre física e diversos outros assuntos. E uma das frases mais faladas nesse mestrado era: A gente "sofre", mas se diverte! E como a gente "sofria" e se divertia ao mesmo tempo. Por fim, deixo meu agradecimento ao programa de pós-graduação em Física Aplicada, junto com o departamento de Física da UFRPE, desde os funcionários aos professores, que forneceram a estrutura e o conhecimento para minha formação. Também a gradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro, cujo apoio foi de importante ajuda.

Resumo

Sistemas quânticos bidimensionais têm sido bastante estudados e utilizados na criação de novos dispositivos, sejam eles térmicos, mecânicos ou eletrônicos. Com a evolução de técnicas experimentais, o controle na fabricação desses sistemas se tornou possível. Nesse trabalho investigamos as propriedades de transporte desses sistemas explorando as mudanças geométricas, como feito por [1] e [2], porém incluindo a massa efetiva dependente da posição. Nós encontramos a equação de Schrödinger para uma superfície de revolução em geral com a massa dependente da posição. Em um segundo momento nós estudamos os efeitos nas propriedades de transporte causados nesses sistemas com a presença de um campo magnético. Para isso seguimos a equação de Schrödinger descrita por [3]. Para ambos os casos nós encontramos expressões para a transmitância e reflexão para uma superfície de revolução. Como aplicação, nós investigamos as propriedades de transporte de nanotubos deformados. Nós encontramos que a inclusão da massa dependente da posição, particularmente uma dependência radial da massa, produz significantes mudanças nas propriedades de transporte, revelando uma sensibilidade dos sistemas quânticos bidimensionais. Encontramos também uma grande sensibilidade nas propriedades de transporte com a inserção do campo magnético, que pode ser utilizado no controle dessas propriedades. Dessa maneira, a inclusão da massa dependente da posição, assim como a inclusão do campo magnético, devem ser consideradas no modelamento de dispositivos de transporte eletrônico na superfície.

Palavras-chave: Massa efetiva; Campo magnético; Nanotubos deformados; Transporte eletrônico.

Abstract

Two-dimensional quantum systems have been much studied and used for the creation of new devices, be they thermal, mechanical or electronic. With the evolution of experimental techniques, the control in the modeling of these systems became possible. In this work we investigate the transport properties of these systems by exploring the geometric changes, as done by [1] and [2], however including the position-dependent mass. We found the Schrödinger equation for a generic surface with the position dependent mass. Afterwards, we studied the effects on transport properties caused in this system by the presence of a magnetic field. For this we followed the Schrödinger equation described by [3]. For both cases we found expressions for the transmittance and reflectance for a general surface of revolution. As an application we investigated the transport properties in deformed nanotubes. We found that the inclusion of the position dependent mass, particularly a radial dependence of the mass, produces significant changes in transport properties, revealing a sensitivity of two-dimensional quantum systems. We also found a great sensitivity in the transport properties with the insertion of the magnetic field, which can be used to control these properties. In this way, the inclusion of a position-dependent mass, as well as the inclusion of the magnetic field, should be considered in the modeling of electronic transport devices in surfaces.

Keywords: Effective mass; Deformed nanotubes; Electronic transport.

Sumário

1	Geometria Diferencial	5
1.1	Curvas	6
1.1.1	Curvas Parametrizadas	6
1.1.2	Vetor Tangente	7
1.1.3	Comprimento de Arco	9
1.1.4	Curvatura	11
1.2	Superfícies	14
1.2.1	Plano Tangente	15
1.2.2	Comprimento e Métrica	18
1.2.3	Curvaturas	20
2	Procedimento de da Costa	24
2.1	Parametrização da Superfície	24
2.1.1	Partícula ligada a uma superfície	26
2.1.2	Potencial Geométrico para coordenadas cilíndricas	29
3	Efeitos da massa efetiva dependente da posição no transporte eletrônico em nanotubos deformados	31
3.1	Massa efetiva	32
3.2	Nanotubos de Carbono	36
3.2.1	Classificação dos nanotubos	37

3.2.2	Vetor quiral	38
3.2.3	Massa efetiva em nanotubos de carbono	39
3.3	Procedimento de da Costa com massa efetiva dependente da posição	42
3.4	Superfície de revolução	45
3.5	Resultados	49
4	Influência do campo magnético no transporte eletrônico em nanotubos deformados	55
4.1	Equação de Schrödinger para uma partícula em superfície curva na presença de um campo eletromagnético	56
4.1.1	Aplicação do procedimento de da Costa	58
4.1.2	Aplicação para superfície cilíndrica	60
4.2	Resultados	66
A	Código Maple para Massa variável	76
B	Código Maple para o campo magnético paralelo	86
	Referências Bibliográficas	98

Lista de Figuras

1.1	Círculo parametrizado.	7
1.2	Definição do vetor tangente.	8
1.3	Círculo com vários vetores tangentes em diferentes direções.	9
1.4	Ponto singular.	9
1.5	Curva formada por vários segmentos de reta.	11
1.6	Vetor curvatura.	12
1.7	Pista de corrida.	13
1.8	Círculo osculador.	14
1.9	Parabolóide elíptico.	15
1.10	Plano Tangente ao ponto P	16
1.11	Coordenadas locais no ponto P	16
1.12	Plano Tangente ao ponto P formado pelos vetores tangentes de $u_1(t)$ e $u_2(t)$	17
1.13	Comprimento de arco entre dois pontos.	18
1.14	Intersecção de um plano perpendicular a superfície S no ponto P	21
1.15	Curvaturas principais.	22
2.1	Parametrização da superfície S	25
3.1	Cadeia tight binding.	33
3.2	Dispersão da cadeia tight binding. Energia versus o vetor de onda na primeira zona de Brillouin.	35
3.3	Classificação dos nanotubos	37

3.4	Vetor quiral e translacional sobre a folha de grafeno.	38
3.5	Relação de dispersão para um nanotubo metálico (10,10) e um semicondutor (17,0) calculados com uma aproximação simples de <i>Tight Binding</i>	40
3.6	Massa efetiva de nanotubos de carbono de parede simples da mais baixa subbanda de condução para diferentes propriedades geométricas, d e θ . \bullet e $+$ representam nanotubos aquirais e quirais, respectivamente. Resultados publicados em [4].	41
3.7	Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1$, $n = 2$, e $n = 3$ respectivamente.	50
3.8	(a) Transmitância; (b) o potencial geométrico com $n = 1$ e $\epsilon = 0.2, 0.6, 1$	51
3.9	(a) Transmitância; (b) o potencial geométrico para $n = 2, 3, 4$ e $\epsilon = 0.2$	52
3.10	Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$, respectivamente.	52
3.11	(a) Transmitância; (b) o potencial geométrico com $n = 1$ e $\epsilon = -0.2, -0.6, -0.8$	53
3.12	(a) Transmitância; (b) o potencial geométrico para $n = 2, 3, 4$ e $\epsilon = -0.2$	53
4.1	Decomposição do campo magnético.	61
4.2	(a) Superfície deformada; (b) força Magnética ao longo da deformação.	63
4.3	(a) Tubo ($\epsilon = 0.2$), (b) a transmitância pela energia incidente (meV), e (c) o potencial efetivo (mV), com (vermelho) e sem (linha azul) a influência do campo magnético.	67
4.4	(a) Tubo ($\epsilon = -0.2$), (b) a transmitância pela energia incidente (meV), e (c) o potencial efetivo (mV), com (vermelho) e sem (linha azul) a influência do campo magnético.	67
4.5	Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$ respectivamente.	69
4.6	(a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 1$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	69
4.7	(a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 2$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	70
4.8	(a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 3$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	70

4.9	Tubos com $\epsilon = -0.4$ e $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$ respectivamente.	71
4.10	(a) Transmitância pela energia incidentete (meV) para $n = 1$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	71
4.11	(a) Transmitância pela energia incidentete (meV) para $n = 2$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	72
4.12	(a) Transmitância pela energia incidentete (meV) para $n = 3$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.	72

Introdução

O desenvolvimento tecnológico está diretamente atrelado ao avanço da ciência, tanto em teoria como experimentalmente. A história da humanidade nos fornece exemplos claros sobre essa questão. Alguns em grande destaque e importância para a humanidade. Dentro do eletromagnetismo podemos citar os desenvolvimentos teóricos de James Maxwell e de suas importantes equações publicadas na metade do século XIX, que levaram Heinrich Hertz à detecção das ondas eletromagnéticas. Ondas essas que atualmente são indispensáveis nos meios de comunicação. Outro grande destaque é atrelado a Thomas Edison com a invenção e aprimoramento de lâmpadas, e a Nikola Tesla com seus trabalhos com correntes alternadas, que são considerados os principais responsáveis por iluminar o nosso mundo. Essas e outras grandes contribuições foram bastante influentes no desenvolvimento na história da humanidade.

Não só a ciência determina o rumo de nossa história, o contrário é bem verdade. Um grande exemplo vem no período da segunda guerra mundial (1939-1945) que exigiu avanços na física nuclear para o desenvolvimento de armas. Outro momento, bem mais glorioso, se deve à corrida aeroespacial. Em que grandes avanços foram realizados no que se diz respeito à ciência dos materiais, e na eletrônica. Dentro dessa época houve uma considerável evolução no processo experimental de produção de materiais com grandes propriedades. Um desses materiais é a fibra de carbono, cuja a leveza e resistência eram ingredientes preciosos para a indústria espacial.

Com o aprimoramento das técnicas de fabricação desses materiais outros foram surgindo, como o caso do nanotubo de carbono, que surge dentro dos estudos com a própria fibra de carbono. Os nanotubos de carbono foram primeiramente observados por Sumio Iijima

[5] utilizando a técnica de microscopia de varredura eletrônica. Os nanotubos de carbono são alvos de grande intensidade de estudos, pois possuem grandes propriedades térmicas, mecânicas e eletrônicas de grande interesse para a pesquisa básica e aplicada. Como eles são bem pequenos e com excelentes características, muitos dispositivos têm sido propostos com o seu uso. Por exemplo, em [6] foi desenvolvido um dispositivo que reduz a resistência térmica entre um dispositivo eletrônico e uma solução de resfriamento. Já em [7] eles construíram um atuador eletromecânico com um nanotubo de carbono de paredes múltiplas que serve como o principal elemento de ativação de movimento.

Já na área da eletrônica, por possuírem características de um condutor, semi-condutor e até isolante são propostos inúmeros aparelhos. Na [8] alguns deles são apresentados, como: fios metálicos, transistores, sensores e *displays*. Ainda dentro da perspectiva da eletrônica, é proposto por [2] e [1] a modelagem de filtros eletrônicos a partir de mudanças da geometria dos nanotubos. Porém, à medida que a geometria é modificada outras propriedades eletrônicas são modificadas, como a massa efetiva. Por exemplo, nanotubos de raios diferentes possuem massas efetivas diferentes.

Aqui nesta dissertação estamos interessados também nos efeitos provocados pela geometria dos nanotubos, contudo, levamos em consideração a dependência da massa efetiva com a posição. A inclusão da dependência da massa efetiva é introduzida pelo hamiltoniano proposto por [9]. Para o confinamento de uma partícula a superfície do nanotubo seguimos o procedimento apresentado em [10]. Com isso derivamos a equação de Schrödinger com a massa dependente da posição para uma partícula confinada a uma superfície. Além disso, encontramos expressões para a transmitância e reflectância.

Como primeira aplicação modelamos o nanotubo a partir de uma curva de revolução em que são incluídas deformações no tubo. Para resolver a equação de Schrödinger desenvolvemos um código no MAPLE com condições de contorno abertas. Utilizamos a expressão calculada por [4] para a massa efetiva de nanotubos de carbono, em que a massa efetiva é função do diâmetro do tubo e da quiralidade. Como resultado, fizemos uma comparação da transmitância entre os casos com e sem a massa dependente da posição, para diferentes deformações. Veremos uma relevância significativa com a inclusão da massa variável.

Na segunda parte do nosso trabalho estamos interessados na aplicação do campo magné-

tico aos nanotubos. Diferente da consideração com a massa efetiva dependente da posição, a aplicação de campos eletromagnéticos é bem difundida em materiais bidimensionais. Com a combinação de sistemas que possuem curvatura e a presença do campo elétrico e magnético novos efeitos aparecem. Como por exemplo, a formação de níveis de Landau [11] e [12], oscilações Aharonov-Bohm [13], e o efeito Hall quântico [14].

Alguns dispositivos também são criados a partir dos efeitos de campos elétricos e magnéticos. Por exemplo, em [15] foi elaborado um sensor químico para detectar dióxido de nitrogênio e amônia. Aqui, além dos efeitos devido à geometria do sistema, iremos investigar os efeitos criados pelo campo magnético aplicado a nanotubos deformados.

A equação de Schrödinger que descreve a dinâmica para uma partícula em uma superfície curva na presença de um campo elétrico e ou de um campo magnético é proposta por [3]. Lá o campo eletromagnético é introduzido via quadripotencial e foi encontrado que não existe acoplamento entre os campos e a curvatura da superfície. É visto também que com uma escolha apropriada de gauge é possível escrever a equação de Schrödinger para a dinâmica superficial.

Nesse trabalho, aplicamos o campo magnético na direção paralela ao eixo da curva de revolução que cria as deformidades. Porém, sem considerar os efeitos da massa efetiva dependente da posição. Como feito para o caso da massa efetiva, adaptamos o código do MAPLE para resolver a equação de Schrödinger na presença do campo magnético, e com isso calcular a transmitância.

Como resultado, é apresentada uma comparação da transmitância na ausência e na presença do campo magnético. Mostraremos também a transmitância para diversos tipos de deformação com o aumento do campo magnético. Veremos que existe uma grande influência desse campo aplicado ao eixo de simetria do tubo.

Para o desenvolvimento desses trabalhos é necessário um conhecimento básico de geometria diferencial. No capítulo 1 são apresentados os conceitos básicos sobre curvas, onde surge o importante conceito de curvatura. Também discutiremos sobre superfícies, onde aparecem as definições de curvatura média e gaussiana. Essas curvaturas surgem naturalmente quando aplicamos o procedimento apresentado no capítulo 2, desenvolvido por [10]. Nesse capítulo veremos que o confinamento de uma partícula a uma superfície pré-definida é

realizada através de um potencial atrativo infinitamente forte. Veremos que para uma dada parametrização da superfície esse procedimento nos leva a uma separação da equação de Schrödinger. Uma para a dinâmica da coordenada perpendicular à superfície e outra para as coordenadas tangenciais.

Por fim, nos capítulos 3 e 4 são apresentados os trabalhos desenvolvidos para a massa efetiva dependente da posição e para o campo magnético aplicado paralelamente ao eixo do nanotubo, respectivamente.

Capítulo 1

Geometria Diferencial

A geometria de maneira geral vem sendo usada desde povos muito primitivos, dentre eles os babilônicos que em torno de 3000 A.C. já sabiam calcular áreas de triângulos e círculos. Além disso, tinham conhecimento sobre o hoje conhecido teorema de Pitágoras.

A geometria até então era bastante utilizada para a medição e construção, por exemplo: os egípcios sabiam calcular os volumes de tronco de pirâmides quadradas, o que proporcionou a construção das suas pirâmides. Ademais, com a construção de instrumentos de medição mais sofisticados, calendários precisos foram desenvolvidos com a localização dos astros, os quais possuíam grande importância na agricultura.

Outra notável civilização foi a grega, a qual contribuiu a passos largos com a geometria com sua forma de dedução lógica. Um dos geômetros grego foi Tales de Mileto que conseguiu medir a altura das pirâmides egípcias através das suas sombras. Outro grande destaque foi Euclides que escreveu o livro “Os elementos”. No qual se pode encontrar muitas demonstrações de postulados como: “Todos os ângulos retos são iguais”; “Juntado igual com igual os totais são iguais”; “O todo é maior do que a parte”. Esses e muitos outros deram suas contribuições para a geometria como: Pitágoras, conhecido pelo teorema que leva o seu nome, e Platão, o qual creditava a origem do universo através de 5 figuras cósmicas perfeitas: Ar-octaedro, Fogo-tetraedro, Universo-dodecaedro, Terra-cubo, Água-icosaedro.

Outra grande época da história da geometria está por volta do século XVII, na qual importantes contribuições foram dadas por Pierre de Fermat, Christiaan Huygens e Isaac

Newton. Fermat descobriu como calcular tangentes de curvas representadas algebricamente. Já Huygens provou muitas propriedades de curvas. E Newton, estava interessado no estudo das curvaturas pro meio do cálculo infinitesimal. Essa junção pioneira de geometria e do cálculo é o surgimento do que conhecemos hoje como geometria diferencial.

Essa geometria não só está voltada para curvas, ela abrange também superfícies e hiper-superfícies. Uma pertinente propriedade de superfícies foi descoberta por Carl Friedrich Gauss por volta do século XIX e ficou conhecida como teorema *egrégio*, o qual afirma que a curvatura gaussiana pode ser determinada sem termos qualquer referência à forma da superfície.

A geometria como um todo tem um prestígio fundamental em diversas áreas do conhecimento. Nesse trabalho ela terá um papel essencial, e muitas definições e construções que serão apresentadas aqui terão grande valor para o entendimento dessa dissertação.

Por questões de simplicidade e cronologia começaremos falando sobre curvas e definiremos o importante conceito de curvatura. Em seguida, estudaremos superfícies, onde aparecem as definições de curvatura média e curvatura gaussiana, as quais irão aparecer naturalmente no nosso trabalho na forma de um potencial geométrico para partículas percorrendo superfícies curvas.

Aqui nós não utilizaremos um grande rigor matemático nas definições. Também nos limitaremos a superfícies no \mathbb{R}^3 , o que é suficiente para o nosso trabalho. Para uma leitura com mais rigor matemático e mais aprofundada em superfícies (no \mathbb{R}^n) veja as referências [16] e [17].

1.1 Curvas

1.1.1 Curvas Parametrizadas

A grosso modo, uma curva é um subconjunto de pontos (x, y, z) de números reais no \mathbb{R}^3 , que em certo sentido se restringe apenas a uma dimensão. Esses subconjuntos de pontos são determinados por funções diferenciáveis de suas coordenadas. Com isso, podemos usar as ferramentas do cálculo diferencial, como derivadas e integrais. A partir dessas ferramen-

tas somos capazes de encontrar algumas características de interesse no estudo de curvas e superfícies. Quando me refiro a funções diferenciáveis quero dizer que as funções possuem derivadas de todas as ordens em todos os pontos. Essas coordenadas, por sua vez, podem ser determinadas por um parâmetro em comum, que é chamado de parâmetro da curva. Por exemplo, um círculo pode ser determinado por suas coordenadas radial (r), e angular (θ), que podem ser funções de uma variável t . Assim podemos definir um círculo de raio $r = 1$, figura 1.1, com a seguinte equação paramétrica

$$\alpha(t) = (\cos(t), \sin(t)), \quad (1.1)$$

aqui a variável t é o parâmetro dessa curva. É esse parâmetro que determina cada ponto da

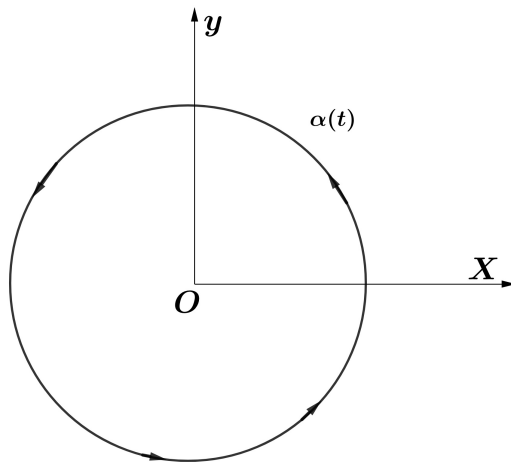


Figura 1.1: Círculo parametrizado.

curva. Pela exigência da função ser diferenciável algumas funções são limitadas a um intervalo onde de fato são diferenciáveis. Então, nada mais natural do que definir um intervalo I para a curva. Por exemplo, na equação 1.1 as funções seno e cosseno são diferenciáveis em qualquer ponto. Assim, $I = (-\infty, +\infty)$.

A seguir definiremos um vetor que tangência $\alpha(t)$ em cada ponto da curva, esse vetor é de grande importância no estudo das curvas e superfícies.

1.1.2 Vetor Tangente

Podemos extrair muitas características e propriedades de uma curva através da definição de um vetor tangente à curva. Para construir tal vetor considere a figura 1.2. Suponha que

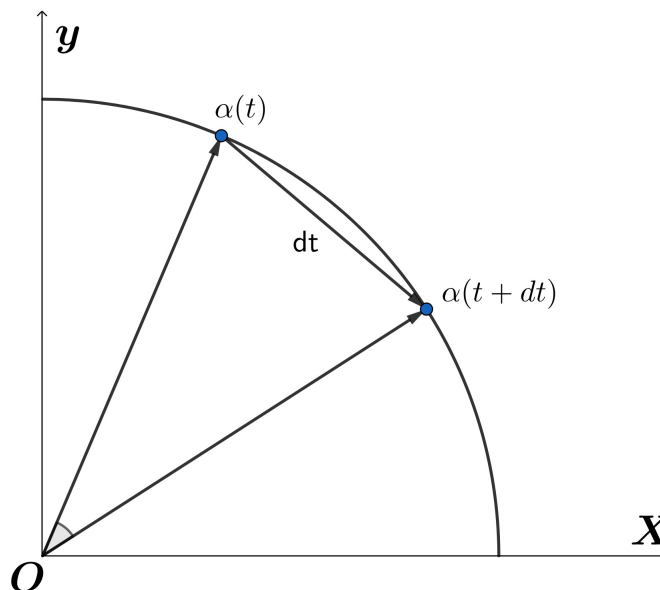


Figura 1.2: Definição do vetor tangente.

percorremos a curva do ponto $\alpha(t)$ até o ponto $\alpha(t + dt)$, o vetor tangente será definido como o vetor unitário que liga esses dois pontos, no limite em que $dt \rightarrow 0$. Assim, temos:

$$\vec{T}(t) = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\alpha(t + dt) - \alpha(t)}{dt} = \frac{d\alpha(t)}{dt} = \alpha'(t), \quad (1.2)$$

onde $\alpha'(t)$ é a derivada de $\alpha(t)$ em relação a t . Note que consideramos t como sendo o comprimento de arco, que será formalmente definido na próxima seção. O vetor tangente é conhecido também como vetor velocidade. É esse vetor que indica a mudança da curva e o quão rápido o faz a medida que variamos t , como podemos ver na figura 1.3.

Nesse caso podemos notar que o vetor tangente aponta em diferentes direções em pontos distintos, ou seja, ele vai mudando a sua direção à medida que percorremos a curva. Para o caso do círculo, vale ressaltar que a inclinação do vetor tangente com as vizinhanças da curva não muda, e assim podemos dizer que a velocidade de mudança da curva é constante. Definiremos mais a frente uma grandeza (curvatura) que medirá o quão veloz o vetor tangente muda com o parametrização.

Um ponto em que $\alpha'(t) = 0$ é um ponto em que o vetor tangente não é diferenciável. A esse ponto chamamos de ponto singular. A figura 1.4 mostra um exemplo onde o vetor tangente não é diferenciável. Note que as derivadas vindo da esquerda e da direita são diferentes. Aqui consideraremos apenas curvas sem pontos singulares, ou seja, curvas que

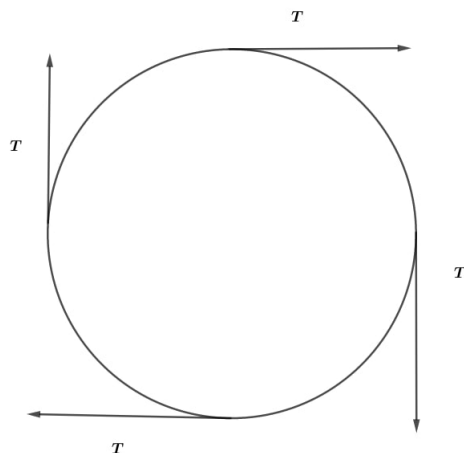


Figura 1.3: Círculo com vários vetores tangentes em diferentes direções.

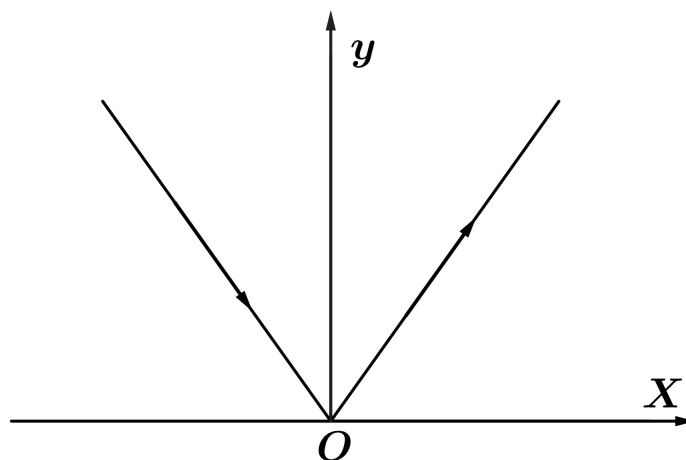


Figura 1.4: Ponto singular.

possuem derivadas, e que estas sejam diferentes de zero em todos os pontos. Essas curvas são chamadas de curvas diferenciáveis parametrizadas regulares. Veremos adiante que podemos medir o comprimento de uma curva a partir do vetor tangente, e fazê-lo parâmetro dessa curva.

1.1.3 Comprimento de Arco

Uma vez que fizemos as considerações anteriores sobre curvas podemos agora definir o comprimento de arco delas. O comprimento de arco é definido como a integral do módulo

do vetor tangente do ponto t_0 ao ponto t , isto é,

$$s = \int_{t_0}^t |\alpha'(t)| dt, \quad (1.3)$$

onde

$$|\alpha'(t)| = \sqrt{(x'(t))^2 + (y'(t))^2 + (z'(t))^2}. \quad (1.4)$$

Com $\alpha'(t) \neq 0$, o comprimento de arco s é uma função diferenciável de t , e $\frac{ds}{dt} = |\alpha'(t)|$. É comum termos como parâmetro o próprio comprimento de arco, nesse caso $\frac{ds}{dt} = 1 = |\alpha'(t)|$; isto é, o vetor velocidade tem comprimento constante igual a 1. Com isso, a equação 1.3 torna-se:

$$s = \int_{t_0}^t dt = t - t_0. \quad (1.5)$$

A ideia por trás da definição da equação 1.3 é bastante simples. É ligar vários pontos da curva por segmentos de reta como fizemos na figura 1.5, mas com muito mais pontos. Ao somar o comprimento de cada segmento de reta teremos o nosso comprimento de arco

$$s = \sum_n \sqrt{(x_{n-1}(t) - x_n(t))^2 + (y_{n-1}(t) - y_n(t))^2 + (z_{n-1}(t) - z_n(t))^2}. \quad (1.6)$$

É claro que com poucos segmentos a medida do comprimento de arco torna-se grosseira. Assim, adicionando muitos segmentos de reta aumentamos a exatidão do comprimento do arco. Ao fazer essa consideração os comprimentos dos segmentos de reta tornam-se cada vez menores e distam apenas de dt . De modo que a equação 1.6 torna-se:

$$s = \sum_n \sqrt{(x_n(t+dt) - x_n(t))^2 + (y_n(t+dt) - y_n(t))^2 + (z_n(t+dt) - z_n(t))^2}. \quad (1.7)$$

Sabendo ainda que:

$$x(t+dt) - x(t) = x'(t)dt, \quad y(t+dt) - y(t) = y'(t)dt, \quad z(t+dt) - z(t) = z'(t)dt, \quad (1.8)$$

a equação 1.7 torna-se:

$$s = \sum_n \sqrt{x'_n(t)^2 + y'_n(t)^2 + z'_n(t)^2} dt. \quad (1.9)$$

Temos que o termo da raiz quadrada é igual ao módulo de $\alpha'(t)$. No limite em que $n \rightarrow \infty$ ou $dt \rightarrow 0$ o somatório da equação 1.9 passa a ser uma integral como em 1.3.

Estudaremos agora o conceito de curvatura, que basicamente nos diz como a curva vai sendo modificada à medida que a percorremos.

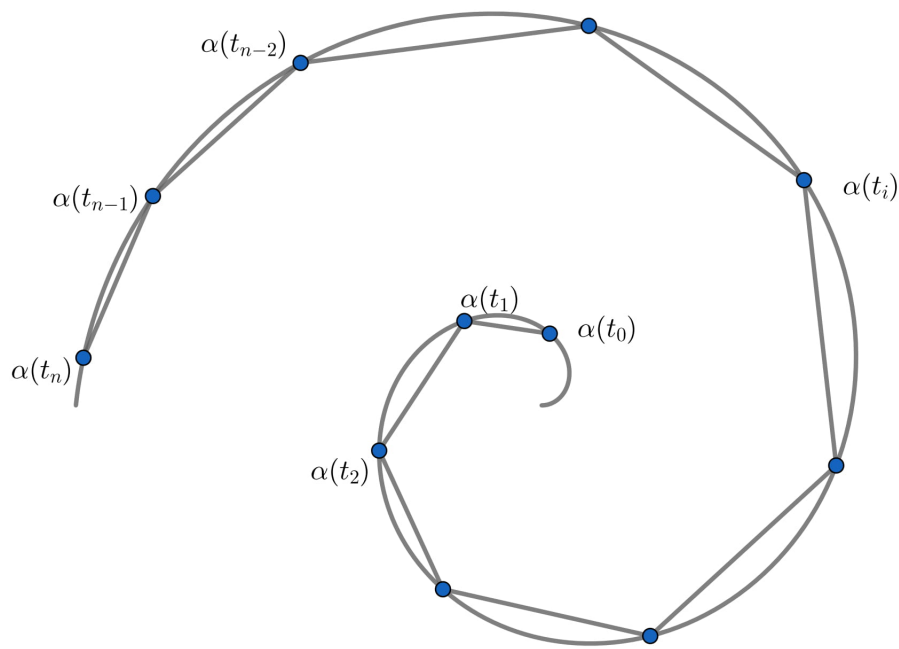


Figura 1.5: Curva formada por vários segmentos de reta.

1.1.4 Curvatura

Uma vez que, definimos o vetor tangente $\vec{T}(t)$ podemos estudar o quanto esse vetor muda de direção com a variação do parâmetro t , e de imediato obter a informação de quanto modificada a curva está sendo.

De maneira mais formal, a curvatura é um vetor $\vec{\kappa}(t)$ normal ao vetor tangente, cujo módulo é a taxa de variação do ângulo que os vetores tangentes fazem as vizinhanças da curva à medida que percorremos a curva variando t . A figura 1.6 ilustra a mudança de inclinação dos vetores tangentes. Nas regiões onde a mudança é grande, o vetor curvatura é mais intenso.

Considerando agora uma curva parametrizada pelo comprimento de arco s (seguiremos com esse parâmetro até que seja dito o contrário) essa taxa de variação é dada pelo módulo

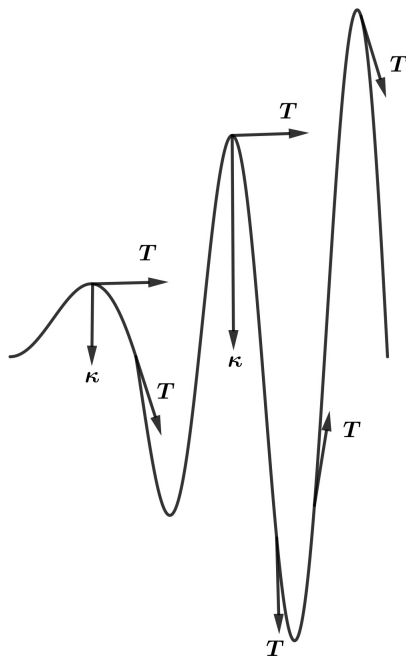


Figura 1.6: Vetor curvatura.

da derivada do vetor tangente $\vec{T} = \alpha'(s)$ e recebe o nome de curvatura

$$\kappa = |\alpha''(s)|, \quad (1.10)$$

e é medido em radianos ou graus por metro. Como já mencionado o vetor de curvatura é normal ao vetor tangente e pode apontar em qualquer direção, mas seu sentido pode ser positivo ou negativo a depender da convenção adotada, até então não vamos nos preocupar com isso.

A curvatura nos diz como o comprimento de uma curva muda à medida que a curva é deformada. Esse vetor também é conhecido como vetor aceleração radial, ele é a velocidade de mudança do vetor tangente ao longo da curva.

Como exemplo, vejamos as curvaturas de uma “pista de corrida” como mostra a figura 1.7. Se movermos o vetor tangente do ponto A em qualquer ponto da vizinhança desse ponto, sem se importar com o sentido, a mudança de direção do vetor tangente será brusca, então temos que a curvatura no ponto A é grande. Já se observarmos a mudança de direção do vetor tangente na região do ponto B , veremos que ela não muda muito de um ponto a outro, portanto a curvatura é pequena nessa região.

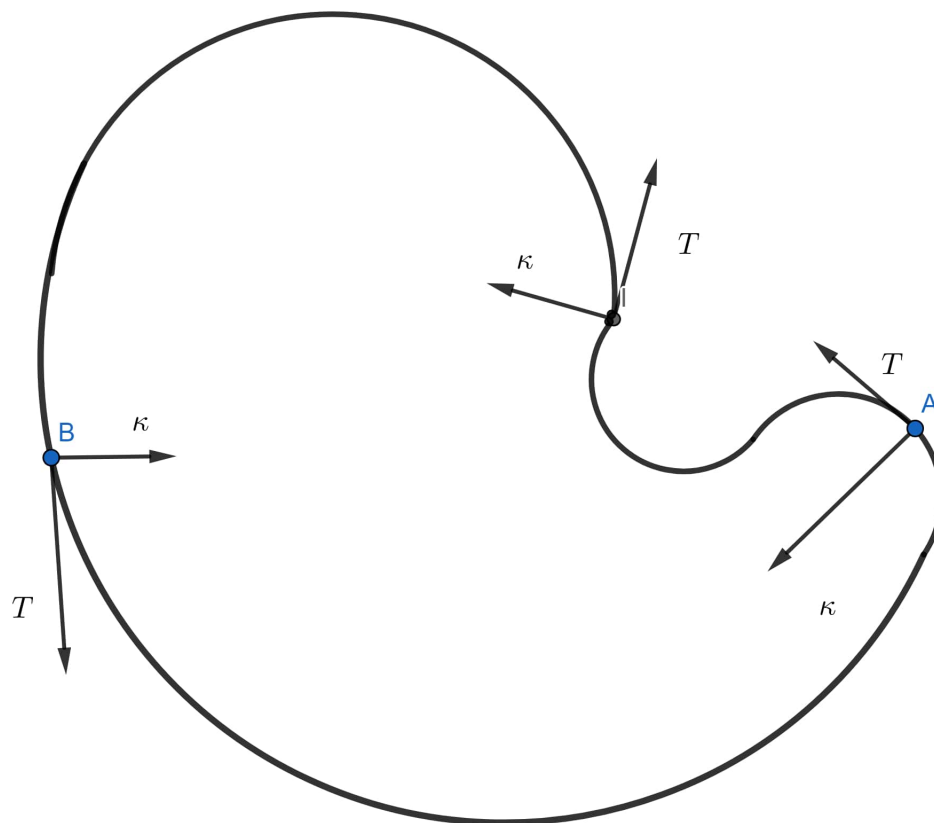


Figura 1.7: Pista de corrida.

Podemos descobrir também a curvatura de um ponto introduzindo um círculo, o de maior raio possível, que tangencia o ponto em questão. Esse círculo é conhecido como círculo osculador, como mostra a figura 1.8. Para um círculo de raio a , o vetor $\vec{\kappa}$ aponta para o centro e temos a curvatura definida por

$$\kappa = \frac{1}{a}, \quad (1.11)$$

onde a é chamado de raio de curvatura. Por exemplo, da figura 1.7 se colocarmos um círculo osculador no ponto A teremos um círculo pequeno, logo pela equação 1.11 a curvatura será grande. Já no ponto B o círculo terá um raio maior e assim sua curvatura será pequena. Imagine agora uma reta. Nesse caso o maior círculo osculador é um círculo de raio infinito, portanto pela 1.11 a curvatura é zero.

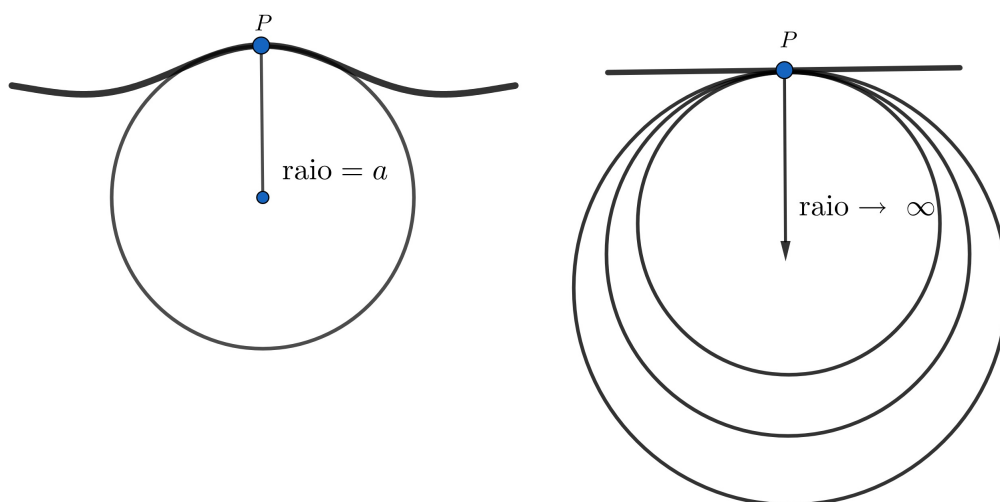


Figura 1.8: Círculo osculador.

Com essas definições para curvas, conseguiremos introduzir o estudo de superfícies e trazer definições similares à curvatura. Aqui, será necessário introduzir uma matriz conhecida como a segunda forma fundamental. Além disso, veremos como calcular o comprimento de arco em superfícies, que está associada à primeira forma fundamental, também conhecida como métrica. Essas definições junto com as definições de curvaturas média e gaussiana serão de grande utilidade no entendimento do cap. 2.

1.2 Superfícies

Localmente uma superfície S , no espaço tridimensional, é dada pelo gráfico de uma função de duas coordenadas

$$z = f(x, y). \quad (1.12)$$

Por exemplo, a superfície da figura 1.9 é dada pelos seguintes pontos:

$$(x, y, z) = \left(x, y, \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} \right), \quad (1.13)$$

onde x e y são livres, e z é determinado por uma função deles. Por sua vez, x e y podem ser funções de um parâmetro t qualquer. Deste modo, os pontos na superfície são dados por funções desse parâmetro. É necessário, assim como para as curvas, que as superfícies sejam suficientemente suaves tal que as noções usuais do cálculo possam ser estendidas a um tal

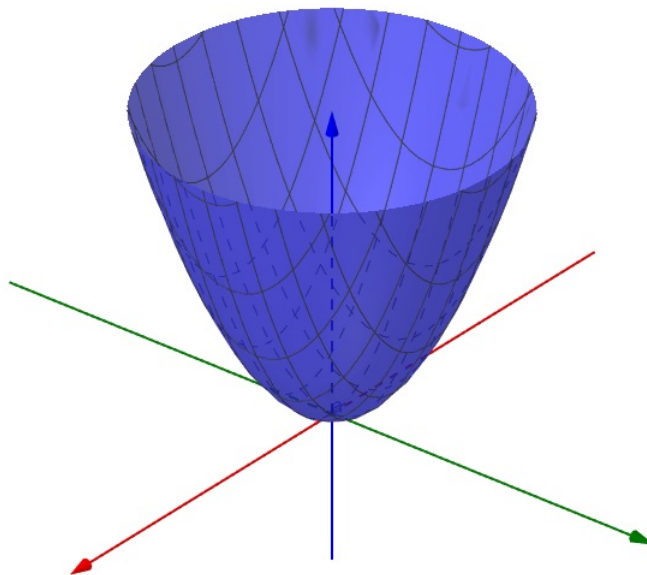


Figura 1.9: Parabolóide elíptico.

conjunto. Baseando-se na seção de curvas seguiremos definindo entes geométricos que na sequência tenham ideias e funções análogas para superfícies.

1.2.1 Plano Tangente

O plano tangente é o análogo do vetor tangente para superfícies. Para o caso das superfícies a definição de apenas um vetor tangente nos daria somente a informação de como a superfície varia no sentido desse vetor. Caso percorrêssemos em qualquer outro sentido precisaríamos definir um novo vetor nesse mesmo sentido. Por isso, definimos o plano tangente.

O plano tangente é um plano constituído pelos vetores tangentes que passam no ponto P . Esse plano toca a superfície apenas uma vez em cada ponto, e cada ponto possui um respectivo plano tangente. A figura 1.10 mostra um plano tangente no ponto P de uma superfície. Para definir esse plano precisamos definir um vetor unitário normal a superfície nesse ponto.

Como veremos na próxima seção é conveniente definirmos novas coordenadas $u_i(t)$ a depender da simetria da superfície. Essas coordenadas são ortogonais entre si e possuem a origem no ponto P . A partir dessas coordenadas nós construiremos o vetor normal. Na figura

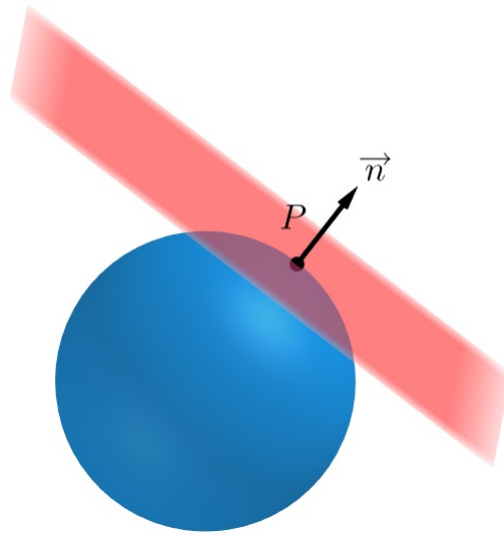


Figura 1.10: Plano Tangente ao ponto P .

1.11 estão representadas as coordenadas locais $u_1(t)$ e $u_2(t)$ em uma superfície esférica. Cada

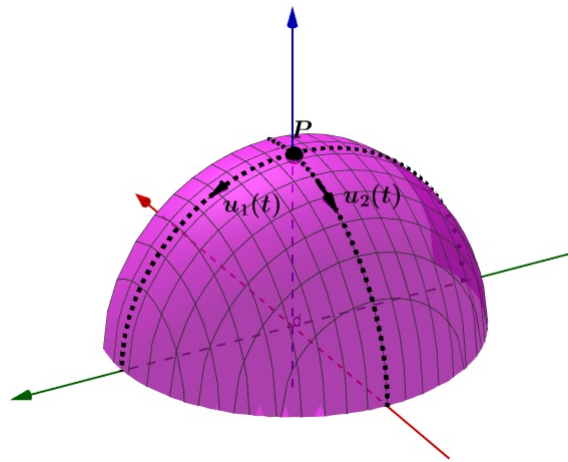


Figura 1.11: Coordenadas locais no ponto P .

coordenada $u_i(t)$ delimita uma curva na superfície, e com isso podemos encontrar vetores tangentes a essas curvas no ponto P . Os quais são determinados por,

$$\vec{T}_i = u'_i(t). \quad (1.14)$$

Esses vetores seguirão o sentido de u_i e serão ortogonais entre si, como ilustra a figura 1.12. O vetor normal será dado pelo produto vetorial dos vetores tangentes

$$\vec{n} = \frac{\vec{T}_1 \times \vec{T}_2}{|\vec{T}_1 \times \vec{T}_2|}, \quad (1.15)$$

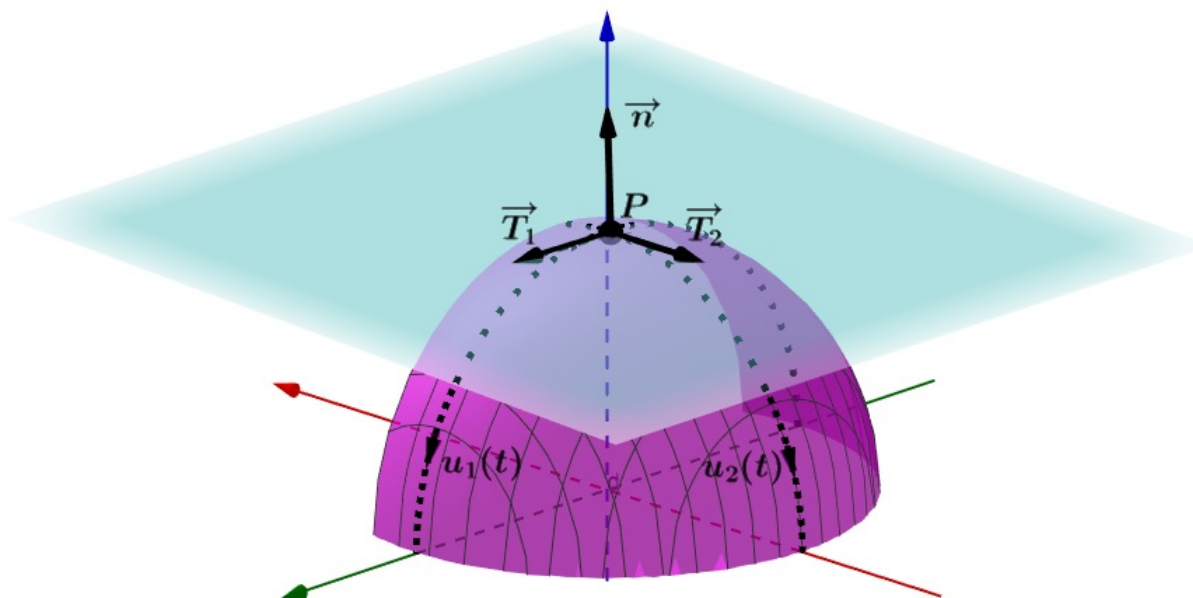


Figura 1.12: Plano Tangente ao ponto P formado pelos vetores tangentes de $u_1(t)$ e $u_2(t)$.

e é indicado na figura 1.12. Uma vez que temos o vetor normal, temos o suficiente para determinar o plano tangente. Para isso, utilizamos a equação geral do plano

$$a(x - x_0) + b(y - y_0) + c(z - z_0) = 0, \quad (1.16)$$

onde os termos a , b e c são as componentes do vetor normal, e x_0 , y_0 e z_0 são as coordenadas do ponto P .

Assim como para curvas, em que a mudança do vetor tangente com a vizinhança da curva nos diz a respeito da curvatura em uma determinada região, o plano tangente pode ser utilizado de forma semelhante. A curvatura em uma superfície pode ser vista como a mudança da inclinação do plano tangente à medida que percorremos alguma direção, ou simplesmente a variação do vetor normal \vec{n} .

Introduziremos na seção de curvaturas de superfícies uma matriz que nos informa tal mudança em relação à direção e ao sentido percorrido. Mas antes veremos como calcular os comprimentos em um dada superfície.

1.2.2 Comprimento e Métrica

Em uma dada superfície plana o comprimento de um ponto a outro é dado simplesmente pela raiz quadrada da soma dos quadrados das diferenças entre cada coordenada, matematicamente falando é:

$$s = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}. \quad (1.17)$$

Mas no que diz respeito a uma superfície S (não confundir com o comprimento de arco s)

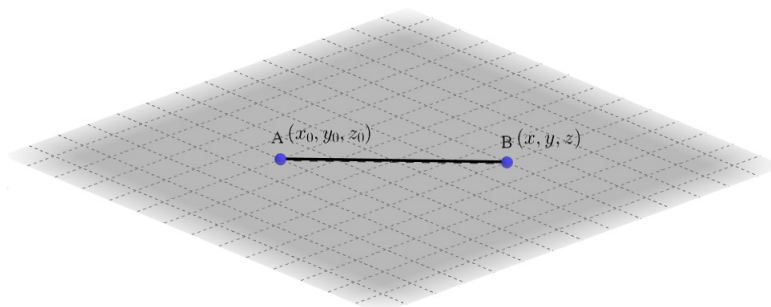


Figura 1.13: Comprimento de arco entre dois pontos.

curva a equação 1.17 torna-se diferente. No plano, é mais conveniente trabalhar com coordenadas cartesianas. Já em superfícies curvas é mais conveniente trabalhar com coordenadas curvilíneas. Por exemplo, em uma superfície esférica é mais oportuno usar coordenadas esféricas.

De uma maneira geral, essas coordenadas são chamadas de coordenadas locais, que denotaremos como u_1 e u_2 . Elas são providas de parametrização entre o domínio no plano u_1 - u_2 e a porção de S . São funções dessas coordenadas que formam a superfície. Tomando mais uma vez como exemplo a superfície de uma esfera de raio a , que é dada por

$$\mathbf{x} = (x, y, z) = (a \sin \phi \cos \theta, a \sin \phi \sin \theta, a \cos \phi), \quad (1.18)$$

temos que ϕ e θ são as coordenadas locais em toda a esfera exceto nos polos. Lá, θ é indefinido e ϕ não é diferenciável.

Em geral, as posições são dadas pelas coordenadas locais u_i . Ao longo de uma curva, essas coordenadas são, por sua vez, funções de um único parâmetro t . As componentes do

vetor posição $\vec{\mathbf{x}}$ de um dado ponto da superfície serão dadas pelas derivadas parciais em relação a u_i

$$\mathbf{x}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u_i} = \left(\frac{\partial x}{\partial u_i}, \frac{\partial y}{\partial u_i}, \frac{\partial z}{\partial u_i} \right), \quad (1.19)$$

e a derivada em relação a t

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{du_i} \frac{du_i}{dt} = \sum \mathbf{x}_i \dot{u}_i. \quad (1.20)$$

Aqui, temos que

$$\dot{\mathbf{x}} = T(t) = \alpha(t)', \quad (1.21)$$

é o nosso vetor tangente definido na equação 1.2. Aqui, $\alpha(t)$ é uma curva na superfície da qual queremos calcular o comprimento de arco. Com isso, retornamos a definição da equação 1.3

$$s = \int_{t_0}^{t_1} |\alpha'(t)| dt,$$

para o comprimento de arco s . Substituindo a equação 1.20 ficamos com:

$$\begin{aligned} s &= \int_{t_0}^{t_1} |\mathbf{x}_1 \dot{u}_1 + \mathbf{x}_2 \dot{u}_2| dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_1) \dot{u}_1^2 + 2(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2) \dot{u}_1 \dot{u}_2 + (\mathbf{x}_2 \mathbf{x}_2) \dot{u}_2^2} dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{\sum_{ij} g^{ij} \dot{u}_i \dot{u}_j} dt, \end{aligned} \quad (1.22)$$

onde

$$g_{ij} \equiv \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j \equiv \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^i} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^j}. \quad (1.23)$$

Como o comprimento de arco é dado por:

$$s = \int ds, \quad (1.24)$$

comparamos com a equação 1.22 e percebemos que

$$ds^2 = \sum_{ij} g_{ij} du^i du^j. \quad (1.25)$$

A matriz formada por g_{ij} é chamada de primeira forma fundamental ou métrica. Como exemplo, vamos calcular a métrica de uma superfície esférica de raio a . Como já mencionado,

as coordenadas locais adequadas são ϕ e θ como indicado na equação 1.18. Com isso podemos calcular cada termo da matriz g_{ij} derivando os termos da equação 1.18 conforme indicado na 1.23

$$\begin{aligned} g_{\phi\phi} &= a^2 \cos^2\phi \cos^2\theta + a^2 \cos^2\phi \sin^2\theta + a^2 \sin^2\phi = a^2, \\ g_{\phi\theta} &= g_{\theta\phi} = -a^2 \sin\phi \sin\theta \cos\phi \cos\theta + a^2 \sin\phi \cos\theta \cos\phi \sin\theta = 0, \\ g_{\theta\theta} &= a^2 \sin\phi \sin\theta \sin\phi \sin\theta + a^2 \sin\phi \cos\theta \sin\phi \cos\theta = a^2 \sin^2\phi. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Colocando na forma matricial, temos

$$g = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & a^2 \sin^2\phi \end{pmatrix}. \quad (1.27)$$

Da equação 1.25 temos então

$$ds^2 = (a^2 d\phi^2 + a^2 \sin^2\phi d\theta^2). \quad (1.28)$$

Como as coordenadas locais podem ser parametrizadas por t temos que:

$$d\phi = \frac{d\phi}{dt} dt = \dot{\phi} dt \quad \text{e} \quad d\theta = \frac{d\theta}{dt} dt = \dot{\theta} dt \quad (1.29)$$

assim ds^2 resulta em

$$ds^2 = (a^2 \dot{\phi}^2 + a^2 \sin^2\phi \dot{\theta}^2) dt^2. \quad (1.30)$$

Na próxima seção estudaremos os tipos de curvaturas em uma superfície. Veremos a definição de curvaturas principais, cujas direções nos forneceram as direções de nossas coordenadas locais. Através delas também é possível definir outros tipos de curvatura, como: a curvatura média e a curvatura gaussiana. Essas curvaturas são de grande importância no nosso trabalho e no estudo de superfícies. No capítulo 2 quando aplicarmos o procedimento de da Costa para o confinamento de uma partícula percorrendo uma superfície curva surgirá um potencial em termos dessas curvaturas, chamado de potencial geométrico ou potencial de da Costa.

1.2.3 Curvaturas

Para realizar o estudo da curvatura em um ponto P de uma superfície devemos antes definir nosso conjunto de coordenadas. É mais conveniente trabalhar com coordenadas locais

que sejam ortogonais entre si. Uma vez definidas as coordenadas precisamos definir outros entes geométricos que nos auxiliem, pois de um mesmo ponto existem mais de uma curvatura, a depender da direção e sentido em que percorremos a superfície.

A determinação da direção de curvatura é determinada por um plano perpendicular à superfície, no qual o ponto P esteja contido, e que será determinado por dois vetores a serem definidos a seguir. A figura 1.14 ilustra tal procedimento. Após esse “corte” a interseção da

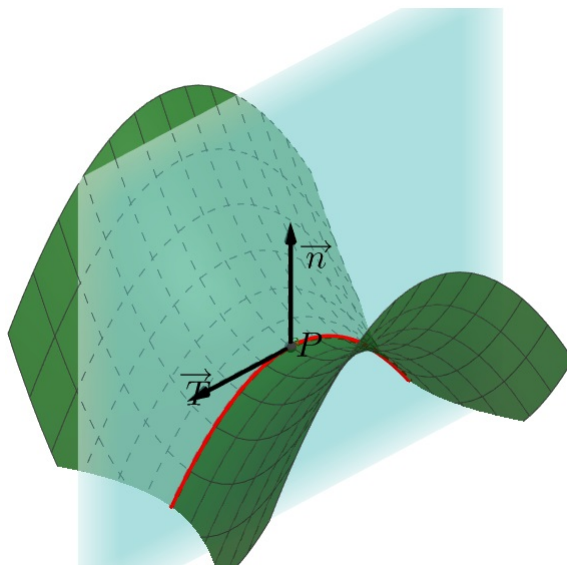


Figura 1.14: Interseção de um plano perpendicular a superfície S no ponto P .

superfície com o plano forma uma curva. Com isso, podemos resgatar tudo que foi visto na seção 1.1.4.

Dessa seção vimos que o vetor curvatura é um vetor normal à curva e que seu módulo é determinado com a mudança do vetor tangente. Então, podemos extrair um vetor tangente \vec{T} à curva de interseção, que indica o sentido percorrido, e um vetor unitário \vec{n} normal à superfície, no ponto P , calculado na seção 1.2.1. São esses vetores que determinam o plano que intersecta a superfície.

Como mencionado, o vetor curvatura está na mesma direção de \vec{n}

$$\vec{\kappa} = \kappa \vec{n}, \quad (1.31)$$

dependendo da direção de \vec{n} a curvatura pode ser positiva ou negativa. A maior curvatura κ_1 e a menor, κ_2 , em um ponto são chamadas de curvaturas principais. Elas ocorrem em

direções ortogonais e determinam a curvatura em todas as direções, observe a figura 1.15.

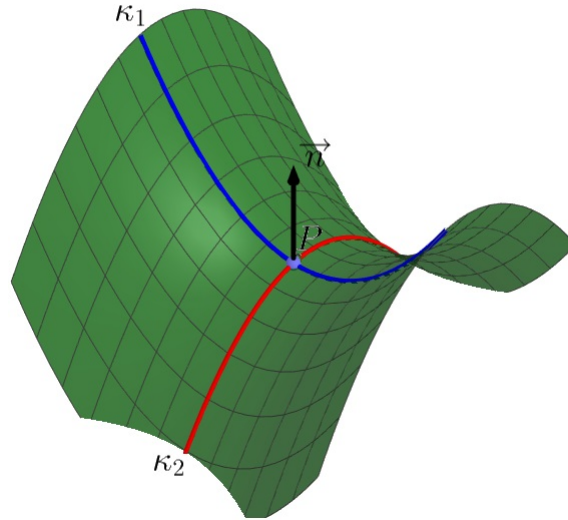


Figura 1.15: Curvaturas principais.

Escolhendo as coordenadas com origem no ponto P e com a superfície S tangente ao plano x - y nesse ponto, a curvatura na superfície formada pela função $z = f(x, y)$, na direção de \vec{T} é dada por

$$\kappa = (D^2 f)_p(\vec{T}, \vec{T}) \equiv \vec{T}^t \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f(P)}{\partial y^2} \end{bmatrix} \vec{T}. \quad (1.32)$$

Por exemplo, se $\vec{T} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\kappa = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f(P)}{\partial y^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\partial^2 f(P)}{\partial x^2}. \quad (1.33)$$

Note que o vetor \vec{T} nos fornece a direção e o sentido que estamos percorrendo a superfície e os elementos da matriz nos diz a curvatura em uma determinada direção.

A matriz simétrica $(D^2f)_p$ é conhecida como a segunda forma fundamental \mathbf{II} da superfície em P . Em qualquer outro ponto precisaremos definir outras coordenadas tangentes ao ponto e reescrever a \mathbf{II} .

Podemos fazer uma escolha de coordenadas ortogonais x, y de forma que \mathbf{II} será substituída por uma matriz diagonal com os elementos dados pelas curvaturas principais

$$\mathbf{II} = \begin{bmatrix} \kappa_1 & 0 \\ 0 & \kappa_2 \end{bmatrix}. \quad (1.34)$$

Dessa maneira, a curvatura em uma certa direção $\vec{v} = (v_x, v_y)$, tal que $|\vec{v}| = 1$, é dada por

$$\kappa = v^t \mathbf{II} v = [v_x, v_y] \begin{bmatrix} \kappa_1 & 0 \\ 0 & \kappa_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} = \kappa_1 v_x^2 + \kappa_2 v_y^2, \quad (1.35)$$

que nada mais é do que uma média das curvaturas principais. Para esse caso, escolhemos as coordenadas para o plano $x-y$ como sendo as direções das curvaturas principais, que são as coordenadas locais. Essas direções são conhecidas como direções principais ou direções de curvatura.

Para esse mesmo sistema de coordenadas podemos, através da segunda forma fundamental, definir mais duas curvaturas, a curvatura média M dada por

$$M = \frac{1}{2} \text{Tr} \mathbf{II} = \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{2} \quad (1.36)$$

e a curvatura de gaussiana K

$$K = \det \mathbf{II} = \kappa_1 \kappa_2, \quad (1.37)$$

que aparecerão no capítulo 2 na forma de um potencial geométrico. Essas curvaturas estão diretamente relacionadas no cálculo da área de superfícies. Aqui, não vamos explorar essas propriedades. O leitor que tiver interesse deve recorrer às referências [16] e [17].

No próximo capítulo estudaremos o procedimento desenvolvido por da Costa [10] no estudo da mecânica quântica em superfícies curvas. Nesse procedimento, veremos o surgimento de alguns ingredientes definidos nesse capítulo, como a primeira e a segunda forma fundamental.

Capítulo 2

Procedimento de da Costa

Neste capítulo mostraremos o procedimento desenvolvido por da Costa [10], que descreve o movimento de uma partícula quântica confinada a uma superfície. Esse método leva em consideração o confinamento da partícula através de um potencial atrativo infinitamente forte, que a mantém presa a uma superfície pré-definida. A ideia é que esse potencial seja constante ao longo da superfície, mas que aumente acentuadamente para pequenos deslocamentos da direção normal. Isso nos levará a uma separação na equação de Schrödinger em duas. Uma que contém as coordenadas superficiais e outra que dependerá da coordenada transversal e do potencial confinante. Na seção a seguir iniciaremos o procedimento definindo a parametrização da superfície proposta por da Costa.

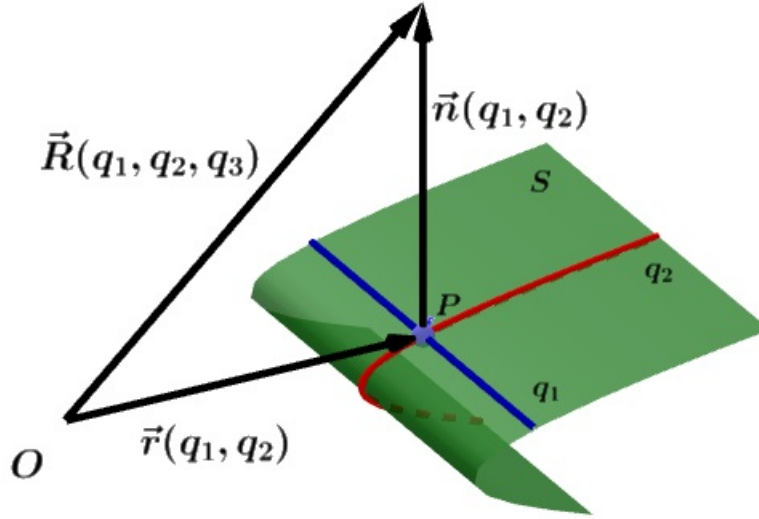
2.1 Parametrização da Superfície

A superfície, que chamaremos de S , pode ser parametrizada por um vetor $\vec{r}(q_1, q_2)$ que nos promove as posições sobre a superfície. Já o espaço tridimensional em que S está contida é parametrizada por

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \vec{N}(q_1, q_2), \quad (2.1)$$

onde $\vec{N}(q_1, q_2)$ é o vetor normal no ponto P na superfície. A figura 2.1 ilustra tais vetores.

Apartir dessa parametrização, nos é permitido escrever o tensor métrico tridimensional

Figura 2.1: Parametrização da superfície S .

G_{ij} . Lembrando que o tensor métrico bidimensional é dado por:

$$g_{ij} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad (2.2)$$

com $i, j = 1, 2$. Temos também que a derivada do vetor normal é calculada através de

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad (2.3)$$

onde α_{ij} são os coeficientes de Weingarten, que são dados por:

$$\alpha_{11} = \frac{1}{g}(g_{12}h_{21} - g_{22}h_{11}), \quad \alpha_{12} = \frac{1}{g}(h_{11}g_{21} - h_{21}g_{11}), \quad (2.4)$$

$$\alpha_{21} = \frac{1}{g}(h_{22}g_{12} - h_{12}g_{22}), \quad \alpha_{22} = \frac{1}{g}(h_{21}g_{12} - h_{22}g_{11}), \quad (2.5)$$

com $g = \det(g_{ij})$, e h_{ij} sendo os termos da segunda forma fundamental. Assim, com a equação 2.1 e 2.3, é possível escrever as seguintes relações:

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + \alpha_{ij}q_3) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad (2.6)$$

e

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} = \vec{N}(q_1, q_2). \quad (2.7)$$

Com o intuito de justificar a recorrência que calcula os termos do tensor métrico G_{ij} , que será apresentada mais adiante, calcularemos os termos $G_{12} = G_{21}$. Pela definição do

tensor métrico

$$G_{ij} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j}, \quad (2.8)$$

devemos calcular

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_1} = (1 + \alpha_{11}q_3) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} + \alpha_{12}q_3 \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2}, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_2} = \alpha_{21}q_3 \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} + (1 + \alpha_{22}q_3) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2}. \quad (2.10)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} G_{12} = & \alpha_{11}\alpha_{21}q_3^2g_{11} + \alpha_{11}\alpha_{22}q_3^2g_{12} + \alpha_{12}\alpha_{21}q_3^2g_{21} + \alpha_{12}\alpha_{22}q_3^2g_{22} \\ & + \alpha_{11}q_3g_{12} + \alpha_{12}q_3g_{22} + \alpha_{21}q_3g_{11} + \alpha_{22}q_3g_{21} + g_{12}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde usamos a equação 2.2. De maneira geral, para qualquer superfície que obedeça à parametrização descrita, os termos do tensor métrico podem ser calculados pelas seguintes relações

$$G_{ij} = g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} q_3^2, \quad G_{i3} = G_{3i} = 0, \quad i, j = 1, 2; \quad G_{33} = 1. \quad (2.12)$$

Note que nos casos em que temos o índice 3 teremos produtos internos dos vetores \vec{r} e \vec{N} , o que justifica a recorrência acima para esses casos.

Uma vez que conseguimos escrever o tensor métrico tridimensional, podemos partir para a equação de Schrödinger. Na próxima seção escreveremos essa equação para uma superfície qualquer, cuja parametrização foi mostrada aqui.

2.1.1 Partícula ligada a uma superfície

Antes de escrever a equação de Schrödinger devemos descrever o potencial que aprisiona a partícula à superfície. Como a nossa partícula não pode ser mais encontrada com total precisão, devido ao princípio da incerteza, é razoável colocar apenas forças confinantes na direção normal à superfície, uma vez que é mais provável encontrar a partícula na superfície.

Para tal aprisionamento, em uma superfície pré-definida, é considerado um potencial atrativo infinitamente forte. Com essas ideias em mente, temos que o potencial confinante é

dado por:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3) = \begin{cases} 0, & q_3 = 0, \\ \infty, & q_3 \neq 0, \end{cases}, \quad (2.13)$$

onde λ é o parâmetro de compressão. Um exemplo de potencial confinante pode ser um potencial harmônico, $V_\lambda(q_3) = \frac{1}{2}m\lambda^2q_3^2$, com λ eventualmente indo para infinito.

Com o já descrito potencial confinante, podemos escrever agora a equação de Schrödinger. Aplicando o laplaciano para coordenadas curvilíneas (q_1, q_2, q_3) , nós obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G^{-1})_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (2.14)$$

onde $G = \det G_{ij}$. Pela equação 2.12 podemos re-escrever a equação acima da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} (\ln \sqrt{G}) \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (2.15)$$

com

$$\nabla^2 = \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G}(G^{-1})_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right). \quad (2.16)$$

Podemos agora propor uma função de onda do tipo

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2)\chi_n(q_3), \quad (2.17)$$

onde o índice t indica uma função de onda dependente apenas das coordenadas tangenciais à superfície. Já n é para a função de onda que depende da coordenada normal. Essa separação é natural uma vez que esperamos a função de onda na superfície depender apenas de q_1 , e q_2 . Para realizar a transformação de $\psi \rightarrow \chi$ necessitamos olhar para o elemento de volume dV em coordenadas curvilíneas, dado por

$$dV = f(q_1, q_2, q_3)dSdq_3, \quad (2.18)$$

onde $dS = \sqrt{g}dq_1dq_2$. Usando as equações 2.6 e 2.7, encontramos que

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + \text{Tr}(\alpha_{ij})q_3 + \det(\alpha_{ij})q_3^2. \quad (2.19)$$

Assim encontramos a relação entre ψ e χ

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \psi(q_1, q_2, q_3). \quad (2.20)$$

Aplicando essa transformação a equação 2.15, encontramos:

$$\sqrt{f} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \chi \right\} + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (2.21)$$

Pondo em prática o limite em que $\lambda \rightarrow \infty$ na equação 2.13, a função de onda terá apenas valor significativamente diferente de zero ao redor de $q_3 = 0$, pois existirá uma barreira de potencial muito forte em ambos os lados da superfície. Com isso, podemos aplicar o limite de $q_3 \rightarrow 0$, assim a equação 2.21 torna-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g}(g^{-1})_{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \det(\alpha_{ij}) \right) \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (2.22)$$

Essa equação é facilmente separável através de 2.17. Isso resulta em duas equações

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3)\chi_n = i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t}, \quad (2.23)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g}(g^{-1})_{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \det(\alpha_{ij}) \right) \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t}. \quad (2.24)$$

A primeira equação é a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula ligada por um potencial transversal, e podemos ignorá-la em futuros cálculos. Já a equação 2.24 contém toda a informação da dinâmica de uma partícula em uma superfície. Nessa mesma equação encontramos um termo que depende apenas da geometria da superfície

$$V_{geo} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha_{ij}) \right]^2 - \det(\alpha_{ij}) \right), \quad (2.25)$$

esse termo é conhecido como potencial geométrico ou potencial da Costa. Utilizando a equação 2.4 somos capazes de re-escrever esse potencial da seguinte maneira

$$V_{geo} = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K), \quad (2.26)$$

onde

$$M = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) = \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \quad (2.27)$$

é a curvatura média e

$$K = \frac{1}{g} \det(h_{ij}) = k_1 k_2, \quad (2.28)$$

é a curvatura gaussiana. Os termos g_{ij} e h_{ij} , com $i, j = 1, 2$, são os elementos da métrica e da segunda forma fundamental. Já k_1 e k_2 são as curvaturas principais.

2.1.2 Potencial Geométrico para coordenadas cilíndricas

Como estamos interessados em nanotubos, iremos agora calcular o potencial geométrico para uma superfície de revolução $f(\phi, q)$, cuja equações paramétricas são dadas por:

$$x = \rho(q) \cos \phi, \quad y = q, \quad z = \rho(q) \sin \phi. \quad (2.29)$$

O potencial geométrico que vamos determinar será de grande utilidade para os próximos capítulos, pois à medida que aplicarmos o procedimento de da Costa ele surgirá naturalmente. Como mostrado na seção 1.2.2, iremos calcular primeiramente a métrica dessa superfície. Temos que os termos são dados por:

$$g_{\phi\phi} = \rho(q) \sin \phi \rho'(q) \cos \phi + \rho(q) \cos \phi \rho'(q) \sin \phi = \rho(q)^2, \quad (2.30)$$

$$g_{qq} = \rho'(q) \cos \phi \rho'(q) \cos \phi + 1 + \rho'(q) \sin \phi \rho'(q) \sin \phi = 1 + \rho'(q)^2, \quad (2.31)$$

$$g_{\phi q} = g_{q\phi} = -\rho'(q) \cos \phi \rho(q) \sin \phi + \rho'(q) \sin \phi \rho(q) \cos \phi = 0, \quad (2.32)$$

ou na forma matricial

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} \rho(q)^2 & 0 \\ 0 & 1 + \rho'(q)^2 \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Prosseguindo, vamos calcular agora a segunda forma fundamental. Temos que a segunda forma fundamental pode também ser calculada da seguinte maneira:

$$h_{ij} = \mathbf{II} \equiv \frac{1}{g} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\phi, q)}{\partial \phi^2} & \frac{\partial f(\phi, q)}{\partial \phi \partial q} \\ \frac{\partial f(\phi, q)}{\partial q \partial \phi} & \frac{\partial^2 f(\phi, q)}{\partial q^2} \end{bmatrix} \vec{n}, \quad (2.34)$$

onde \vec{n} é o vetor normal calculado pela equação 1.15. Calculando as segundas derivadas de $f(\phi, q)$, temos:

$$\frac{\partial^2 f(\phi, q)}{\partial \phi^2} = (-\rho(q) \cos \phi, 0, -\rho(q) \sin \phi), \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial^2 f(\phi, q)}{\partial q^2} = (\rho''(q) \cos \phi, 0, \rho''(q) \sin \phi), \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial f(\phi, q)}{\partial q \partial \phi} = \frac{\partial f(\phi, q)}{\partial \phi \partial q} = (-\rho'(q) \sin \phi, 0, \rho'(q) \cos \phi). \quad (2.37)$$

Já o vetor normal, não normalizado, é dado por:

$$\vec{n} = (-\rho(q) \cos \phi, \rho(q) \rho'(q), -\rho(q) \sin \phi). \quad (2.38)$$

Calculando o produto interno das segundas derivadas com o vetor normal, e utilizando a equação 2.33, podemos escrever a segunda forma fundamental da seguinte maneira:

$$h_{ij} = \frac{1}{\sqrt{1 + \rho'(q)^2}} \begin{pmatrix} \rho(q) & 0 \\ 0 & -\rho''(q) \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Com isso, podemos agora calcular o potencial geométrico usando as equações 2.27, e 2.28, o que nos leva a

$$V_{geo} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{[1 + \rho'(q)^2 + \rho(q)\rho''(q)]^2}{\rho(q)^2 [1 + \rho'(q)^2]^3}. \quad (2.40)$$

A equação 2.40 é o potencial geométrico geral para a parametrização do nanotubo $\rho(q)$.

Esse potencial surgirá em todas as situações em que usarmos tal parametrização. Nessa dissertação, trabalharemos em duas circunstâncias bem diferentes, porém com a mesma parametrização do nanotubo, e o potencial geométrico na forma da equação 2.40 irá surgir nas nossas equações.

Uma dessas condições será vista no próximo capítulo, em que iremos realizar o procedimento de da Costa partindo de um Hamiltoniano em que a massa efetiva é dependente da posição da partícula.

Capítulo 3

Efeitos da massa efetiva dependente da posição no transporte eletrônico em nanotubos deformados

Com o passar dos anos o interesse em estudos da dinâmica de partículas em superfícies bidimensionais tem aumentado cada vez mais. Isso é devido ao aprimoramento experimental de se construir estruturas bidimensionais com bastante controle, como o grafeno, fulereno, e nanotubos de carbono.

Em muitos estudos um fator importante é negligenciado, o de considerar a massa efetiva dependente da posição. Aqui nós encontraremos a equação de Schrödinger para superfícies em geral levando em consideração a massa variável com a posição. Temos como intuito estudar propriedades eletrônicas em estruturas bidimensionais como o nanotubo de carbono, que como veremos possui uma massa efetiva distinta para diferentes diâmetros, como mostra [4].

Para isso, seguimos o procedimento descrito por da Costa para o confinamento de uma partícula em uma superfície, e assim obtendo o potencial geométrico para sistemas com a massa dependente da posição. Esse potencial não sofre mudanças na forma de sua equação, porém a consideração da massa variando com a posição nos leva a algumas mudanças nas propriedades de transporte. Além disso, na equação de Schrödinger surgem dois termos

extras devido a essa inclusão. Com isso, nós calculamos as expressões para a transmitância e a reflectância para superfícies de revolução em geral.

Como primeira aplicação nós estudamos o transporte eletrônico em nanotubos deformados, assim como feito por [1], porém considerando a massa efetiva variável. Para isso, desenvolvemos um código no MAPLE para calcular a transmitância para diferentes tipos de deformações do tubo. Isso nos revelou uma significativa mudança nas propriedades de transporte, as quais são sensíveis à massa dependente da posição. Essa sensibilidade deve ser levada em conta no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos bidimensionais.

Na próxima seção iremos introduzir o conceito básico de massa efetiva. Para isso, descreveremos brevemente o modelo *Tight Binding* para uma rede cristalina unidimensional.

3.1 Massa efetiva

Em uma rede cristalina os elétrons podem ser transferidos de um átomo para outro. Porém, essa passagem não é realizada livremente. Existe uma interação direta do elétron com os átomos vizinhos a ele. Uma das principais interações é a presença das forças coulombianas entre a rede e os elétrons transferidos. Para estudar a interação da rede como o elétron foi desenvolvido o modelo *Tight Binding* que nos fornece algumas informações.

Dentro desse modelo surge o conceito de massa efetiva. Aqui faremos uma pequena introdução desse modelo com a finalidade de compreender a ideia de massa efetiva. O leitor mais interessado no modelo *Tight Binding* pode conseguir mais informações nas referências [18] e [19].

Por questões de simplicidade trataremos aqui o caso de uma rede unidimensional. Imagine agora uma cadeia de N átomos, igualmente espaçados e que cada átomo possui apenas um orbital. O orbital do átomo n vai ser chamando de $|n\rangle$. A figura 3.1 ilustra o esquema. Os elétrons em cada orbital podem se transferir de um orbital para o outro.

A função de onda geral é dada por:

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (3.1)$$

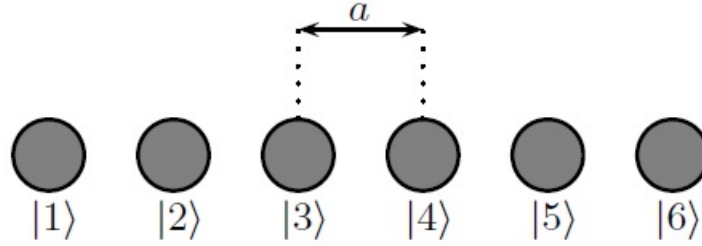


Figura 3.1: Cadeia tight binding.

Fonte: SIMON, S. H.. The Oxford Solid State Basics. Oxford University Press, 2003.

E a equação de Schrödinger efetiva pode ser escrita como

$$\sum_m H_{nm} \phi_m = E \phi_n, \quad (3.2)$$

onde H_{nm} é o elemento de matriz do hamiltoniano

$$H_{nm} = \langle n | H | m \rangle. \quad (3.3)$$

O Hamiltoniano pode ser escrito como a soma da energia cinética $K = p^2/(2m)$ mais a interação coulombiana V_j do elétron na posição r com os núcleos dos sítios j

$$H = K + \sum_j V_j, \quad (3.4)$$

onde V_j é função das posições

$$V_j = V(r - R_j), \quad (3.5)$$

com R_j sendo a posição do j -ésimo núcleo. Ao aplicarmos $|m\rangle$ pela esquerda na equação 3.4 temos que

$$H |m\rangle = (K + V_m) |m\rangle + \sum_{j \neq m} V_j |m\rangle, \quad (3.6)$$

onde $K + V_m$ é a energia de um simples núcleo e o somatório corresponde aos outros núcleos do sistema. Com isso, temos que os elementos do hamiltoniano podem ser escritos como

$$H_{nm} = \langle n | H | m \rangle = \epsilon_a \delta_{n,m} + \sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle, \quad (3.7)$$

em que ϵ_a corresponde a energia do elétron no núcleo m na ausência de outro núcleo. O último termo da equação 3.7 é entendido como a interação entre um orbital e outro núcleo

próximo. Geralmente a transferência de um elétron entre os orbitais é realizada apenas entre os primeiros vizinhos, ou seja, os átomos n e m devem estar próximos. Assim, temos que

$$\sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle = \begin{cases} V_0, & n = m, \\ -t, & n = m \pm 1, \\ 0, & \text{outro caso,} \end{cases} \quad (3.8)$$

onde o termo V_0 representa apenas uma mudança de energia no sítio e não uma transferência de elétrons. Com isso, os elementos da matriz do hamiltoniano são dados por:

$$H_{nm} = \epsilon_0 \delta_{n,m} - t(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}), \quad (3.9)$$

onde definimos

$$\epsilon_0 = \epsilon_a + V_0. \quad (3.10)$$

O termo t é responsável por permitir que o elétron vá de um sítio para o outro, e possui dimensão de energia. A magnitude desse termo depende diretamente das distâncias de cada núcleo. Quanto mais próximos os átomos, mais intenso é t . Conseqüentemente, quanto mais longe os sítios mais fraco é t .

A solução do modelo *Tight Binding* para nossa cadeia unidimensional é dada por:

$$\phi_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}, \quad (3.11)$$

onde o fator \sqrt{N} é devido a normalização de uma rede de N átomos, a corresponde as distâncias entre os núcleos, e k é o vetor de onda. Para essa solução é considerada a equação de Schrödinger independente do tempo. Caso contrário, deveríamos ter um fator de $e^{i\omega t}$. Devido à periodicidade da rede temos que $k \rightarrow k + 2\pi/a$ nos fornece a mesma solução. Além disso, se considerarmos condições de contorno periódicas, em uma rede com comprimento $L = Na$, os valores permitidos de k são quantizados em unidades de $2\pi/L$. Dessa maneira, existem N soluções para a equação 3.11.

Substituindo a equação 3.11 na equação de Schrödinger ficamos com:

$$\sum_n H_{n,m} \phi_m = \epsilon_0 \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} - t \left(\frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{-ik(n-1)a}}{\sqrt{N}} \right) = E \phi_n. \quad (3.12)$$

Assim, o espectro de energia é dado por:

$$E = \epsilon_0 - 2t \cos(ka). \quad (3.13)$$

A partir da equação 3.13 podemos obter a curva de dispersão (figura 3.2) com periodicidade $k \rightarrow k + 2\pi/a$. Note que a dispersão do elétron possui um mínimo e um máximo de energia,

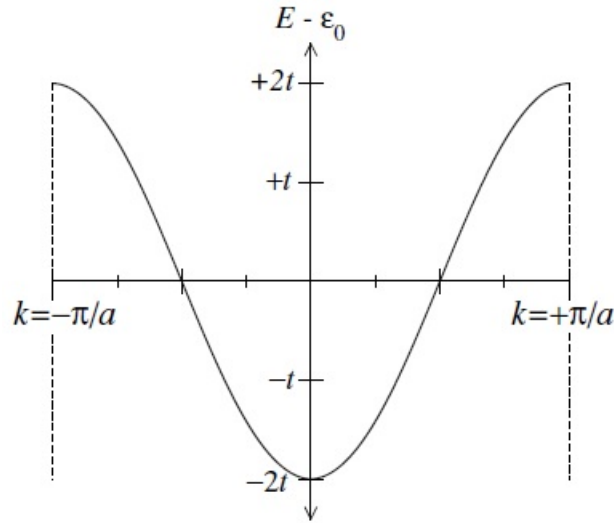


Figura 3.2: Dispersão da cadeia tight binding. Energia versus o vetor de onda na primeira zona de Brillouin.

Fonte: SIMON, S. H.. The Oxford Solid State Basics. Oxford University Press, 2003.

ou seja, eles só possuem autoestados em uma banda de energia. O que é diferente para um elétron livre, o qual pode ter qualquer energia. A diferença entre o máximo e o mínimo de energia é conhecido como largura de banda. Vale destacar que a largura de banda depende diretamente da distância a entre os átomos. Neste modelo temos que a largura de banda é de $4t$.

Perceba que na parte inferior da banda a dispersão é aproximadamente parabólica, esse comportamento é similar à dispersão de elétrons livres dada por:

$$E_{livre}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.14)$$

Assim, podemos ver a parte inferior da banda de dispersão como sendo a de um elétron quase livre, porém com uma massa diferente. Essa massa é denominada como massa efetiva m^* . Podemos calcular a massa efetiva igualando a equação 3.14 com o ponto mínimo da dispersão

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = ta^2 k^2, \quad (3.15)$$

onde o membro direito calcula a dispersão mínima. E assim temos que

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}. \quad (3.16)$$

Outra definição, mais geral é dada por:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)^{-1}. \quad (3.17)$$

Portanto, resumidamente, a massa efetiva m^* é definida como a dispersão da parte inferior da banda, que é exatamente a dispersão de uma partícula livre de massa m^* .

Na próxima seção iremos apresentar os nanotubos de carbono. Veremos que a massa efetiva deles, assim como outras propriedades, mudam de acordo com a construção de sua rede, a qual é determinada apenas por dois números inteiros m , n . Apresentaremos a equação empírica desenvolvida por [4] que modela o valor da massa efetiva como uma função do diâmetro do nanotubo de carbono. Será essa função que usaremos para calcular o valor da massa efetiva em cada ponto da deformação do nanotubo.

3.2 Nanotubos de Carbono

Materiais formados por átomos de carbono são encontrados em grande variedade na natureza, como por exemplo o grafite, diamante, fibras de carbono, fulerenos, grafeno, e nanotubos de carbono. Essas matérias são bastante estudadas com diversas finalidades.

Por exemplo, a fibra de carbono por volta do século XIX foi utilizada por Thomas Edison na criação de filamentos para lâmpadas elétricas de bulbo. Uma grande intensidade na pesquisa em fibras de carbono se deu após a segunda guerra mundial. Nesta época, existia a necessidade de se construir materiais mais resistentes e leves para a indústria aeroespacial, o que conduziu ao aprimoramento das técnicas de crescimento de fibras de carbono. Pesquisas focadas no controle do processo de crescimento permitiu a comercialização desses materiais.

Com o aperfeiçoamento desses processos foi se observando o crescimento de filamentos de diâmetros muito pequenos e ocios. Esses tubos foram denominados de nanotubos de carbono. Os primeiros nanotubos foram primeiramente observados por Sumio Iijima [5] utilizando a técnica de microscopia de varredura eletrônica. O grande interesse nos nanotubos de carbono

está ligada diretamente a suas ótimas propriedades mecânicas, térmicas e eletrônicas. Por exemplo, o seu módulo de Young é cinco vezes maior do que o do aço. Já no que diz a propriedades térmicas, ele é considerado um bom condutor térmico com condutividade térmica oito vezes maior que a prata. Além disso, existem nanotubos de carbono condutores, assim como semicondutores. Os nanotubos de carbono são encontrados em diversos tamanhos e de diferentes formações. A seguir mostraremos as classificações dos nanotubos de carbono.

3.2.1 Classificação dos nanotubos

Os nanotubos de carbono são definidos como uma folha cilíndrica de grafeno com diâmetro entre 0.7-10 nm. Sendo que os mais observados são os com diâmetros menores que 2 nm.

Os nanotubos de carbono são formados por um rede de hexágonos de carbono, e de acordo com o seu arranjo é classificado como aquiral ou quiral. Os nanotubos aquirais são aqueles que possuem estrutura que são idênticas quando espelhadas. A presença de um espelho em uma parte da rede faz com que ele gere o restante da rede. Existem dois tipos de nanotubos com essa característica, o *armchair* e o *zigzag*. A figura 3.3 mostra a estrutura dos diferentes nanotubos. Os nomes *armchair* (poltrona em inglês) e *zigzag*, estão diretamente

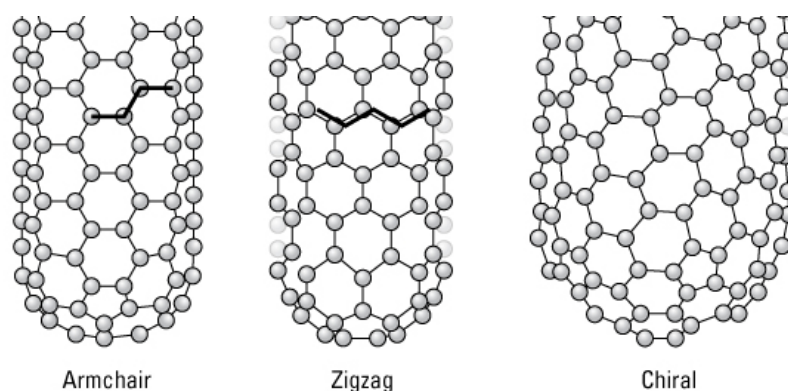


Figura 3.3: Classificação dos nanotubos

Disponível em: <http://www.understandingnano.com/electrical-properties-carbon-nanotubes.html>

[//www.understandingnano.com/electrical-properties-carbon-nanotubes.html](http://www.understandingnano.com/electrical-properties-carbon-nanotubes.html)

Acesso em: 02 de julho de 2018.

relacionados com a formação da sua rede, como se pode notar na figura 3.3. Já os nanotubos

quirais possuem simetria espiralar. Quando colocamos uma parte da rede em frente a um espelho ela não consegue gerar a parte que falta. A figura 3.3 mostra a estrutura chiral. Note que cada hexágono é colocado na “diagonal” de outro hexágono, formando assim a rede.

3.2.2 Vetor quiral

Para estudar os nanotubos de carbono é necessário definir dois vetores ortogonais entre si. São eles o vetor translacional \vec{T} e o vetor quiral \vec{C}_h , como ilustra a figura 3.4.

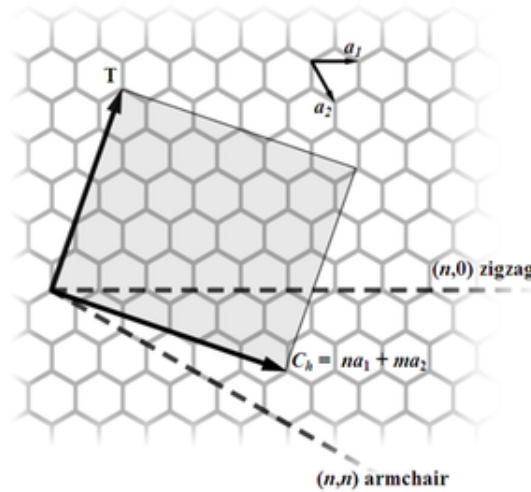


Figura 3.4: Vetor quiral e translacional sobre a folha de grafeno.

Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/Nanotubo_de_carbono Acesso em: 02 de julho de 2018.

O vetor translacional está na direção do eixo do tubo e sua direção determina a direção de crescimento do comprimento do tubo. Já o vetor quiral é definido como uma combinação de dois números inteiros n e m com os vetores unitários \vec{a}_1 e \vec{a}_2 que formam a rede hexagonal do grafeno:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m), \quad (3.18)$$

onde

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right), \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right), \quad (3.19)$$

com a sendo as distâncias entre os carbonos da rede. O nanotubo pode ser representado apenas por (n, m) , sendo esses dois parâmetros responsáveis pela determinação de muitas

de suas propriedades. Por exemplo, o tipo de formação da rede é determinada pelo ângulo θ entre \vec{C}_h e \vec{a}_1 , dado por:

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{C}_h||\vec{a}_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}. \quad (3.20)$$

Quando tivermos $n = m$ o ângulo será de $\theta = 30^\circ$ definindo um tubo do tipo *armchair*. Já quando $m = 0$ teremos um nanotubo do tipo *zigzag* com $\theta = 0^\circ$. E com $n \neq m$ o tubo será quiral com $0^\circ < \theta < 30^\circ$.

Outra característica importante para o nosso trabalho é a determinação do diâmetro dos nanotubos por esses dois números inteiros. Quando enrolada a folha de grafeno o vetor chiral irá contornar o tubo, de forma que o seu módulo determina o comprimento de circunferência L do nanotubo

$$L = |\vec{C}_h| = \sqrt{\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h} = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}. \quad (3.21)$$

Com isso, podemos determinar o diâmetro d do tubo como sendo:

$$d = \frac{L}{\pi} = \frac{a}{\pi}\sqrt{n^2 + m^2 + nm}. \quad (3.22)$$

Assim, mudando os parâmetros n e m muitas propriedades são diretamente alteradas. Dentre essas alterações, a massa efetiva é modificada para cada par n e m .

3.2.3 Massa efetiva em nanotubos de carbono

Como vimos, os dois parâmetros n e m determinam a forma da estrutura do nanotubo e o seu diâmetro. Como consequência da mudança da estrutura da rede, ocorre a mudança nas propriedades eletrônicas, diferenciando nanotubos condutores e semicondutores. Isso está diretamente ligado com a mudança na banda de dispersão dos nanotubos. Para mais detalhes ler o capítulo 4 da [20].

Na figura 3.5 vemos a estrutura de banda de um nanotubo metálico (esquerda) e um nanotubo semicondutor (direita). Como ilustrado, é razoável propor que a massa efetiva do nanotubo de carbono depende de n e m , e conseqüentemente do seu diâmetro. Essa proposta foi feita por [4] onde foi determinada uma equação empírica para a massa efetiva dependente do diâmetro do nanotubo. Uma vez que, a parte inferior da banda de dispersão tem um

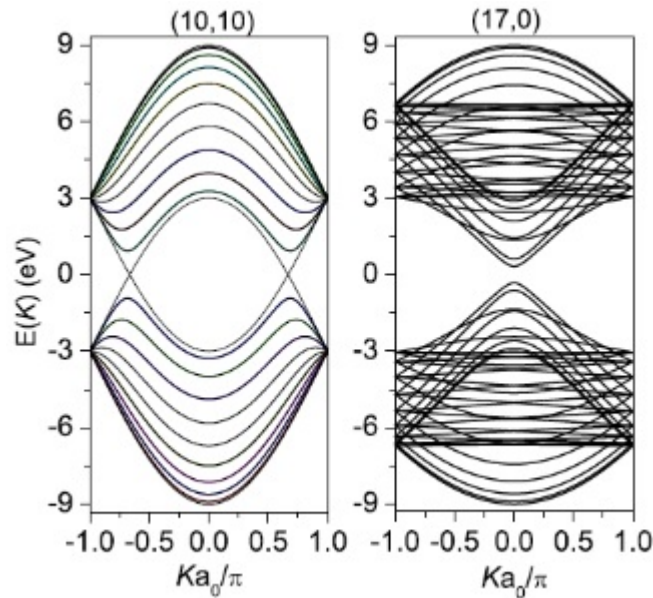


Figura 3.5: Relação de dispersão para um nanotubo metálico (10,10) e um semiconductor (17,0) calculados com uma aproximação simples de *Tight Binding*.

Disponível em:

http://www2.dbd.puc-rio.br/pergamum/tesesabertas/0321141_07_cap_02.pdf

Acesso em: 07 de julho de 2018.

formato parabólico, eles estimaram que essa banda tem um formato de um polinômio de segundo grau

$$E(k) = Ak^2 + Bk + C. \quad (3.23)$$

E usando o modelo *Tight Binding*, levando em conta interações até o terceiro vizinho mais próximo, eles calcularam 133 estruturas de banda para nanotubos com diferentes diâmetros e quiralidades. A figura 3.6 mostra a massa efetiva em função do diâmetro apresentada por [4]. Essa figura demonstra que a massa efetiva possui uma dependência da quiralidade, e que a massa efetiva decresce com o aumento do diâmetro.

Após empregar uma técnica de regressão chegaram a seguinte equação empírica:

$$m^* = \frac{8m_0\hbar^2}{9\gamma_0^2 a} d^{-0.7835} e^{7.4 \times 10^{-3}\theta}, \quad (3.24)$$

onde γ_0 é a sobreposição de energia, m_0 é a massa efetiva do elétron livre, d é o diâmetro do nanotubo, e θ é o ângulo chiral que nos fornece o tipo do nanotubo. A sobreposição

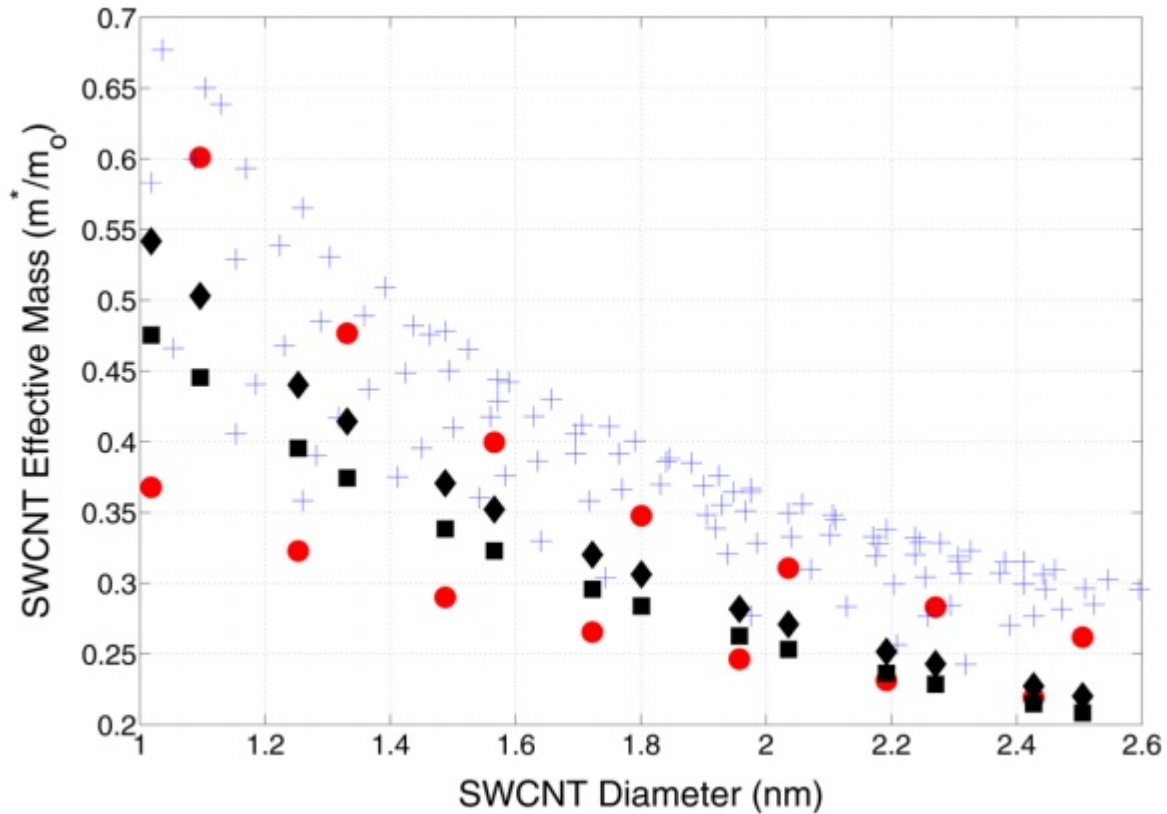


Figura 3.6: Massa efetiva de nanotubos de carbono de parede simples da mais baixa sub-banda de condução para diferentes propriedades geométricas, d e θ . \bullet e $+$ representam nanotubos aquirais e quirais, respectivamente. Resultados publicados em [4].

de energia é um fator de ajuste que é adicionada durante os cálculos da banda de *gap* de nanotubos semicondutores. A equação 3.24 vai ser utilizada em nossos cálculos numéricos para determinar a massa efetiva do elétron em cada posição da deformação no nanotubo.

Na próxima seção iremos aplicar o procedimento de da Costa levando em consideração a dependência da massa efetiva com a posição. Lá veremos que surgem dois termos extras na equação de Schrödinger dependentes da massa. Teremos também que o potencial geométrico será afetado pela mudança da massa efetiva ao longo do tubo.

3.3 Procedimento de da Costa com massa efetiva dependente da posição

Considere uma partícula com massa variável dependente da posição $m(q_1, q_2)$ permanentemente presa a uma superfície S , descrita da mesma maneira que na seção 2.1. Quando a massa efetiva depende da posição, o operador energia cinética não é mais hermitiano. Várias modificações neste operador já foram propostas para torná-lo hermitiano [9]. Uma possibilidade é considerar todas as permutações entre os operadores na energia cinética, o que dá

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{6} \left[\frac{1}{m} \Delta + \nabla \frac{1}{m} \nabla + \Delta \frac{1}{m} \right], \quad (3.25)$$

onde ∇ é o operador del, e Δ é o operador laplaciano. Considerando $\hat{H}\psi = E\psi$ e usando as identidades bem conhecidas

$$\begin{aligned} \nabla(fg) &= f \nabla g + g \nabla f, \\ \nabla \cdot (fv) &= f \nabla \cdot v + v \cdot (\nabla f) \end{aligned} \quad (3.26)$$

a equação de Schrödinger para uma partícula livre com massa variável pode ser escrita de maneira geral como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{\hbar^2}{2} \left[\nabla \left(\frac{1}{m} \right) \right] \nabla \psi - \frac{\hbar^2}{6} \left[\Delta \left(\frac{1}{m} \right) \right] \psi = E\psi. \quad (3.27)$$

Para calcularmos a equação de Schrödinger com a massa dependente das coordenadas da superfície iremos aplicar o procedimento de da Costa visto no capítulo anterior. No procedimento de da Costa é introduzido um potencial confinante $V_\lambda(q_3)$ que aprisiona a partícula à superfície curva de espessura d , em que $d \rightarrow 0$. Em coordenadas curvilíneas (q_1, q_2, q_3) , a equação de Schrödinger 3.27 é escrita como:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\sqrt{G}} \partial_\mu \left(\sqrt{G} G^{\mu\nu} \partial_\nu \psi \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2} \left[G^{\mu\nu} \left(\partial_\nu \frac{1}{m} \right) (\partial_\mu \psi) \right] - \\ - \frac{\hbar^2}{6} \left[\frac{1}{\sqrt{G}} \partial_\mu \left(\sqrt{G} G^{\mu\nu} \partial_\nu \frac{1}{m} \right) \right] \psi + V_\lambda(q_3) \psi = i\hbar \partial_t \psi, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde, mais uma vez, $G_{\mu\nu}$ são os termos da primeira forma fundamental, com $\mu, \nu = 1, 2, 3$, e $G = \det(G_{\mu\nu})$. Vale esclarecer que as coordenadas q_1 e q_2 são as coordenadas tangenciais à

superfície, enquanto q_3 é a coordenada normal. Também é necessário destacar que quando consideramos a massa constante a equação 3.28 retorna à equação original de Schrödinger.

Como estamos utilizando o mesmo tipo de parametrização de da Costa, a primeira forma fundamental é a mesma da equação 2.12

$$G_{ij} = g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} q_3^2, \quad G_{i3} = G_{3i} = 0, \quad i, j = 1, 2; \quad G_{33} = 1, \quad (3.29)$$

onde $i, j = 1, 2$, $g_{ij} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}$, e α_{ij} são coeficientes de Weingarten. Assim a equação 3.28 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i \sqrt{g} g^{ij} \partial_j \psi \right) - \frac{\hbar^2}{6} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i \sqrt{g} g^{ij} \partial_j \frac{1}{m} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{6} \left(\partial_{q_3}^2 \frac{1}{m} + \partial_{q_3} (\ln \sqrt{G}) \partial_{q_3} \frac{1}{m} \right) \psi - \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \left(\partial_{q_3}^2 \psi + \partial_{q_3} (\ln \sqrt{G}) \partial_{q_3} \psi \right) \frac{1}{m} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\partial_{q_3} \frac{1}{m} \right) (\partial_{q_3} \psi) + V_\lambda(q_3) \psi = i\hbar \partial_t \psi. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como já visto, esse tensor métrico tende a nos levar a uma separação da equação de Schrödinger entre a coordenada normal e as coordenadas transversais à superfície. Isso só é possível, uma vez que consideramos a massa efetiva da partícula dependente de q_1 e q_2 , dessa maneira a primeira e a segunda derivada de $1/m$ em relação a q_3 são nulas, e a equação 3.30 é reduzida a

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i \sqrt{g} g^{ij} \partial_j \psi \right) - \frac{\hbar^2}{6} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i \sqrt{g} g^{ij} \partial_j \frac{1}{m} \right) \psi - \frac{\hbar^2}{2} g^{ij} \left(\partial_j \frac{1}{m} \right) (\partial_i \psi) - \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \left(\partial_{q_3}^2 \psi + \partial_{q_3} (\ln \sqrt{G}) \partial_{q_3} \psi \right) \frac{1}{m} + V_\lambda(q_3) \psi = i\hbar \partial_t \psi. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Assim como feito no capítulo anterior, vamos introduzir uma nova função de onda do mesmo tipo da equação 2.17

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2) \chi_n(q_3), \quad (3.32)$$

onde n indica uma dependência com a coordenada normal e t com as coordenadas tangenciais.

Como visto, essa mudança de função de onda é realizada através de:

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \psi(q_1, q_2, q_3), \quad (3.33)$$

com

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + \text{Tr}(\alpha_{ij}) q_3 + \det(\alpha_{ij}) q_3^2. \quad (3.34)$$

Aplicando essa transformação em 3.31 chegamos a

$$\begin{aligned}
 & -\sqrt{f}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) - \frac{\hbar^2}{6}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{1}{m}\right)\chi - \\
 & -\sqrt{f}\frac{\hbar^2}{2}g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)\left(\partial_i\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_{q_3}^2\chi + \frac{1}{4f^2}\left[(\partial_{q_3}f)^2 - 2f\partial_{q_3}^2f\right]\chi\right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar\partial_t\psi.
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

No procedimento de da Costa (e aqui) a espessura d tende a zero, assim podemos fazer $q_3 \rightarrow 0$, isto produz:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\chi)\right] - \frac{\hbar^2}{6}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{1}{m}\right)\right]\chi - \frac{\hbar^2}{2}\left[g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\chi)\right] - \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left[\frac{1}{2}\text{Tr}(\alpha_{ij})\right]^2 - \det(\alpha_{ij})\right)\chi - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_{q_3}^2 + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar\partial_t\psi.
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

Temos que a equação 3.36 pode ser separada em uma equação que envolve χ_n

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{q_3}^2\chi_n + V_\lambda(q_3)\chi_n = i\hbar\partial_t\chi_n, \tag{3.37}$$

e outra que envolve χ_t

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\chi_t)\right] - \frac{\hbar^2}{6}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{1}{m}\right)\right]\chi_t - \frac{\hbar^2}{2}\left[g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\chi_t)\right] - \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left[\frac{1}{2}\text{Tr}(\alpha_{ij})\right]^2 - \det(\alpha_{ij})\right)\chi_t = i\hbar\partial_t\psi_t.
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

O último termo da equação 3.38 é o nosso potencial geométrico

$$V_{geo} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left[\frac{1}{2}\text{Tr}(\alpha_{ij})\right]^2 - \det(\alpha_{ij})\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}[M^2 - K], \tag{3.39}$$

onde M e K são as curvaturas média e gaussiana respectivamente. Perceba que o potencial geométrico não muda de forma com a introdução da massa efetiva. Porém ele é inversamente proporcional a ela, e como veremos, o simples fato de introduzir a massa dependente da posição nos levará uma mudança na intensidade desse potencial. Note também que a diferença é que a equação de Schrödinger agora possui dois termos extras que contém a derivada em relação a massa $m(q_1, q_2)$.

Em resumo a equação 3.38 é a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma superfície geral com a massa dependente da posição. É nessa equação que contém a

informação da dinâmica da partícula ao longo da superfície, e por essa razão iremos trabalhar apenas com ela daqui em diante neste capítulo.

Na próxima seção iremos fazer a primeira aplicação. Vamos introduzir o caso para superfícies de revolução com simetria cilíndrica. Obteremos expressões para a transmitância e reflexão para superfícies de revolução em geral.

3.4 Superfície de revolução

A superfície de revolução é criada a partir de uma curva bidimensional rotacionada em torno de um eixo. A parametrização adotada aqui é a de uma superfície cilíndrica que é dada por:

$$x = \rho(q_2) \cos \phi, \quad y = q_2, \quad z = \rho(q_2) \sin \phi, \quad (3.40)$$

onde a curva é rotacionada no eixo y para criar a superfície de revolução. Já $\rho(q_2)$ é o raio da superfície, que depende apenas de q_2 . Temos aqui que q_2 e ϕ são as nossas coordenadas locais, e que são tangenciais a superfície, assim o hamiltoniano torna-se:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[(g^{-1})_{11} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + (g^{-1})_{22} \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \sqrt{q_2} (g^{-1})_{22} \right) \frac{\partial}{\partial q_2} \right] - \\ & -\frac{\hbar^2}{6} \left[(g^{-1})_{22} \left(\frac{\partial^2}{\partial q_2^2} \frac{1}{m} \right) + \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \sqrt{q_2} (g^{-1})_{22} \right) \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \frac{1}{m} \right) \right] - \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[(g^{-1})_{22} \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \frac{1}{m} \right) \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \right) \right] + V_{geo}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde levamos em conta que a massa efetiva não depende da coordenada angular. Para a parametrização da equação 3.40 já calculamos o potencial geométrico na seção 2.1.2

$$V_{geo} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{[1 + \rho'(q_2)^2 + \rho(q_2)\rho''(q_2)]^2}{\rho(q_2)^2 [1 + \rho'(q_2)^2]^3}. \quad (3.42)$$

A dependência apenas de q_2 no potencial geométrico nos permite separar a equação de Schrödinger em duas equações diferenciais ordinárias. Uma para a parte angular

$$\Phi'' + A\Phi = 0, \quad (3.43)$$

e a outra para a coordenada axial

$$\Upsilon'' + \left[F(q_2) + m \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \frac{1}{m} \right) \right] \Upsilon' + \left[\frac{m}{3} \left(\left(\frac{\partial^2}{\partial q_2^2} \frac{1}{m} \right) + F(q_2) \left(\frac{\partial}{\partial q_2} \frac{1}{m} \right) \right) + G(q_2) (E_I - V) \frac{2m}{\hbar^2} \right] \Upsilon = 0 \quad (3.44)$$

onde $\Phi(\phi)$ e $\Upsilon(q_2)$ são as autofunções angular e axial respectivamente. E G conjuntamente com F são definidos como

$$G \equiv 1 + \rho'^2 \quad \text{e} \quad F \equiv \frac{\rho'}{\rho} \left[1 - \frac{\rho \rho''}{(1 + \rho'^2)} \right]. \quad (3.45)$$

Temos que a equação 3.44 possui a forma da seguinte equação diferencial

$$\psi''(q_2) + V_1(q_2)\psi'(q_2) + V_2(q_2)\psi(q_2) = 0. \quad (3.46)$$

Fazendo $\psi(q_2) = \phi(q_2)\lambda(q_2)$ nos fornece

$$\phi''(q_2) + \left(2\frac{\lambda'}{\lambda} + V_1 \right) \phi'(q_2) + \left(\frac{\lambda''}{\lambda} + V_1\frac{\lambda'}{\lambda} + V_2 \right) \phi(q_2) = 0. \quad (3.47)$$

Agora, com

$$2\frac{\lambda'}{\lambda} + V_1 = 0 \quad (3.48)$$

e

$$\frac{\lambda''}{\lambda} + V_1\frac{\lambda'}{\lambda} + V_2 = W, \quad (3.49)$$

nós temos

$$\phi''(q_2) + W\phi(q_2) = 0, \quad (3.50)$$

com $\lambda(q_2)$ dada pela solução de 3.48:

$$\lambda(q_2) = e^{-\frac{1}{2}P(q_2)}, \quad (3.51)$$

onde $P(q_2)$ é a primitiva para a função $V_1(q_2)$, tal que $P'(q_2) = V_1(q_2)$. Com isso,

$$W = -\frac{1}{4}V_1^2 - \frac{1}{2}V_1' + V_2. \quad (3.52)$$

A solução para a equação 3.46 pode então ser encontrada pela solução de

$$\phi''(q_2) + \left(-\frac{1}{4}V_1^2 - \frac{1}{2}V_1' + V_2 \right) \phi(q_2) = 0. \quad (3.53)$$

Uma vez que estamos interessados na transmitância devido a uma superfície de revolução com comprimento L e raio $\rho(q_2)$, nós consideramos a injeção de elétrons de energia E_k vindo da parte negativa do eixo q_2 . Assim, temos

$$\begin{aligned}\psi(q_2) &= a_0 e^{ik_0 q_2} + b_0 e^{-ik_0 q_2} && \text{para } q_2 \leq 0, \\ &= a_L e^{-ik_L(q_2-L)} + b_L e^{ik_L(q_2-L)} && \text{para } q_2 \geq L,\end{aligned}\quad (3.54)$$

onde

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k - V_{geo}(0))}, \quad (3.55)$$

e

$$k_L = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_k - V_{geo}(L))}, \quad (3.56)$$

são os vetores de onda incidente e transmitido, respectivamente. Perceba que $V_1(q_2) = 0$ para q_2 fora do intervalo $0 < q_2 < L$, o que torna as equações 3.46 e 3.53 idênticas. Então, a equação 3.54 é também válida para $\phi(q_2)$, e assim temos que $\psi(0) = \phi(0)$, tal como $\psi(L) = \phi(L)$. Como iremos ver, isso implica que a reflectância e a transmitância não dependem de $\lambda(q_2)$ e pode ser obtida diretamente de $\phi(q_2)$. Escolhemos a normalização da função de onda incidente como $a_0 = 1$. Também consideramos apenas funções de onda saindo na região de $q_2 \geq 0$, o que nos leva a $a_L = 0$. Essas são as condições de contorno do problema. Pela normalização acima, a transmitância e a reflectância podem ser obtidas pela corrente de densidade de probabilidade

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*). \quad (3.57)$$

Tal que, a corrente incidente é obtida através de

$$j_{inc} = \frac{\hbar k_0}{m^*(0)}, \quad (3.58)$$

e a corrente refletida é fornecida pela expressão

$$j_{ref} = \frac{\hbar k_0}{m^*(0)} |b_0|^2. \quad (3.59)$$

Por fim, a corrente transmitida é dada por

$$j_{trans} = \frac{\hbar k_L}{m^*(L)} |b_L|^2. \quad (3.60)$$

Todas as correntes em valores absolutos. Dessa maneira, a transmitância é obtida através de:

$$T = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{m^*(0) k_L}{m^*(L) k_0} |b_L|^2 \quad (3.61)$$

e a reflectância, por sua vez, é determinada por

$$R = \frac{j_{ref}}{j_{inc}} = |b_0|^2. \quad (3.62)$$

Em termos da função de onda, as condições de contorno $a_0 = 1$ e $a_L = 0$ são

$$a_0 = \frac{1}{2} \left[\phi(0) - \frac{i\phi'(0)}{k_0} \right] = 1 \quad (3.63)$$

e

$$a_L = \frac{1}{2} \left[\phi(L) + \frac{i\phi'(L)}{k_L} \right] = 0, \quad (3.64)$$

uma vez que $\psi(q_2) = \phi(q_2)$ em $x = 0$ e $x = L$. Da equação 3.54 nós temos que

$$b_0 = \phi(0) - 1 \quad (3.65)$$

e

$$b_L = \phi(L). \quad (3.66)$$

Portanto, a transmitância e a reflexão são dadas por:

$$T = \frac{m^*(0) k_L}{m^*(L) k_0} |\phi(L)|^2, \quad (3.67)$$

$$R = |\phi(0) - 1|^2. \quad (3.68)$$

Então, o problema se reduz a encontrar $\phi(0)$ e $\phi(L)$ que é realizado resolvendo a equação diferencial 3.53 acoplada às equações algébricas 3.63 e 3.64 no intervalo $0 \leq x \leq L$. Essa é a essência do método de condições de contorno aberta para resolver uma equação diferencial ordinária com as condições de contorno de Robin, isso é, a especificação de uma combinação linear dos valores de uma função e os valores de suas derivadas na fronteira do domínio.

Com as expressões acima nós implementamos um código no MAPLE, disponível no apêndice A, para resolver recursivamente o conjunto misto de equações diferenciais e algébricas 3.53, 3.63 e 3.64 e encontrar, para cada energia injetada, $\phi(0)$ e $\phi(L)$. E consequentemente, a transmitância e reflectância como especificado pelas equações 3.67 e 3.68,

respectivamente. Usamos um sistema de unidades mistas, com as energias incidentes em meV , as distâncias em nm , a massa do elétron livre é $m_e = 5.68 \times 10^{-27} meV.s^2/nm^2$, e a constante de Planck é $\hbar = 6.58 \times 10^{-13} meV.s$.

Na próxima seção iremos apresentar a curva cuja revolução em torno do eixo q_2 cria a superfície usada para modelar o nosso nanotubo. Faremos uma comparação entre o caso em que consideramos a massa efetiva constante, feita recentemente por [1], com o caso em que levamos em conta a massa efetiva dependente da posição.

3.5 Resultados

Vamos calcular aqui a transmitância em nanotubos deformados. Para isso, vamos utilizar a seguinte curva na criação de ondulações e compressões

$$\rho(q_2) = R \pm \frac{R\epsilon}{2} \left[1 - \cos \left(2 \frac{n\pi q_2}{L} \right) \right], \quad (3.69)$$

onde R é o raio inicial e final do nanotubo, ϵ nos fornece a intensidade do crescimento (para $\epsilon > 0$) ou decrescimento (para $\epsilon < 0$) do raio do nanotubo, L é o comprimento da superfície deformada, e n é o número de ondulações ou compressões. Como mencionado na seção 3.2.3 iremos utilizar a massa efetiva da equação 3.70

$$m^* = \frac{8m_0\hbar^2}{9\gamma_0^2 a} d^{-0.7835} e^{7.4 \times 10^{-3}\theta}, \quad (3.70)$$

que possui uma dependência em relação ao diâmetro do nanotubo. Consideramos os casos para $\theta = 0$, caracterizando um nanotubo metálico do tipo zigzag. A figura 3.7 ilustra algumas das superfícies consideradas com $\epsilon > 0$ e com $n = 1, 2, 3$. Para todos os casos considerados aqui, tomamos R na equação 3.69 como sendo igual a 5 nm.

No caso da massa constante, levamos em conta que a massa não muda na deformação, o que significa usar a massa efetiva de um nanotubo com $\epsilon = 0$ na equação 3.69. A massa efetiva para esse caso pode ser visto na Tabela 3.1, onde nós definimos o parâmetro $\zeta = m^*/m_e$, o qual nos fornece a intensidade da modificação da massa efetiva comparada a massa do elétron livre.

Nas figuras 3.8 à 3.12 estão os nossos resultados, onde consideramos os casos da massa constante (linha contínua) e variável (linha pontilhada tracejada). Na figura 3.8 nós consi-

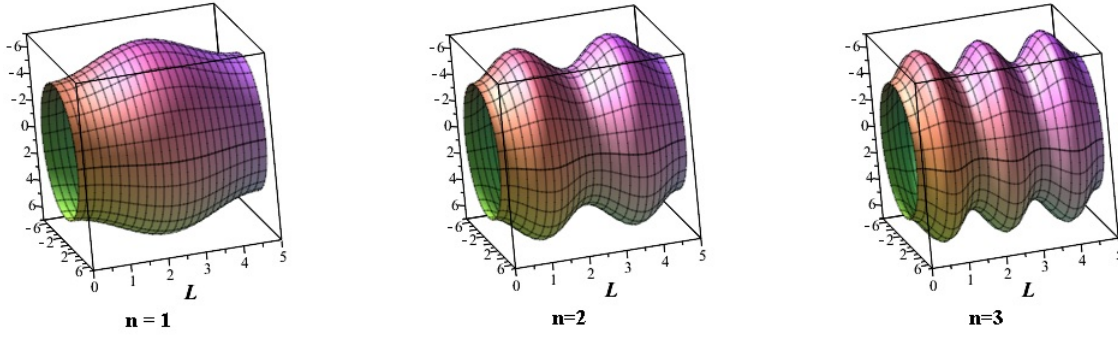


Figura 3.7: Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1$, $n = 2$, e $n = 3$ respectivamente.

Tabela 3.1: Valores do parâmetro ζ no centro da deformação para diferentes valores de ϵ .

ϵ	$\zeta(m^*/m_e)$
1	0.04353858056
0.6	0.05185650718
0.2	0.06496699234
0	0.07494303341
-0.2	0.08926069477
-0.6	0.1536445870
-0.8	0.2644686912

deramos que a deformação do tubo é dada por uma ondulação, $n = 1$, como mostra a figura 3.7. Quando comparamos as equações 3.39 e 2.40 elas são idênticas, de modo que a forma das curvas para o potencial geométrico não é modificada. Porém, a equação 3.39 possui uma dependência da massa efetiva, que é inversamente proporcional a ela. Uma vez que o crescimento do raio do nanotubo induz um decréscimo na massa efetiva, como podemos ver na tabela 3.1, o caso da massa variável terá um potencial geométrico mais profundo em comparação com o da massa constante, como mostra na figura 3.8 (b). É possível perceber que, à medida que o valor de ϵ aumenta, o que significa uma ondulação maior, a inclusão da massa dependente da posição torna-se mais importante. Isso pode ser visto claramente na figura 3.8 (a). Podemos ver que a dependência da massa com a posição corrige a localização dos picos ressonantes na transmitância, revelando a importância de considerar tal dependência nas propriedades de transporte do sistema. É importante lembrar que a dependência

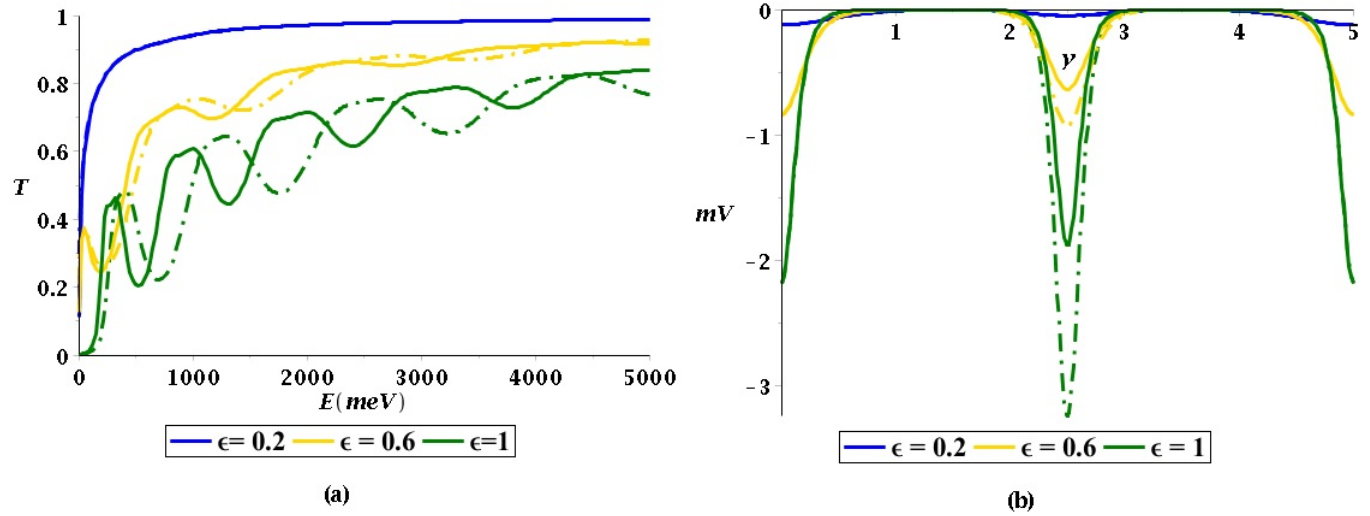


Figura 3.8: (a) Transmitância; (b) o potencial geométrico com $n = 1$ e $\epsilon = 0.2, 0.6, 1$.

da massa com a posição introduz dois termos extras no hamiltoniano, além de modificar o potencial geométrico.

Na figura 3.9 consideramos nanotubos com mais de uma ondulação; $n = 2, 3, 4$. A ondulação considerada aqui é mais sutil do que no primeiro caso. Com apenas uma ondulação e com um pequeno crescimento a inclusão da massa variável não é muito diferente do caso da massa constante. Porém, com o aumento das ondulações a influência da massa variável torna-se muito importante. De fato, aumentando o número de ondulações o potencial geométrico tende a um pente de Dirac, como mostra a figura 3.9 (b). Como consequência, *gaps* de energia aparecem no espectro de energia. Esses *gaps* de energia tornam-se mais bem definidos com o aumento de ondulações. A inclusão da massa efetiva variável altera a largura do *gap* de energia e sua localização na energia, como mostra a figura (a). De fato, o *gap* de energia para o caso da massa variável é mais largo comparado com o caso da massa constante. Isso revela que, para usar a curvatura no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos baseados em nanotubos, a dependência da massa com a posição desempenha um importante papel.

A figura 3.10 ilustra as superfícies dos próximos casos, em que consideramos uma compressão do nanotubo fazendo $\epsilon < 0$ e $n = 1, 2, 3$. E as figuras 3.11 e 3.12 mostram a transmitância e o potencial geométrico para esses casos. Assim como nos casos das ondulações, a relevância da massa efetiva dependente da posição é notada. Note também que a consideração da massa efetiva variável corrige a localização dos picos ressonantes da trans-

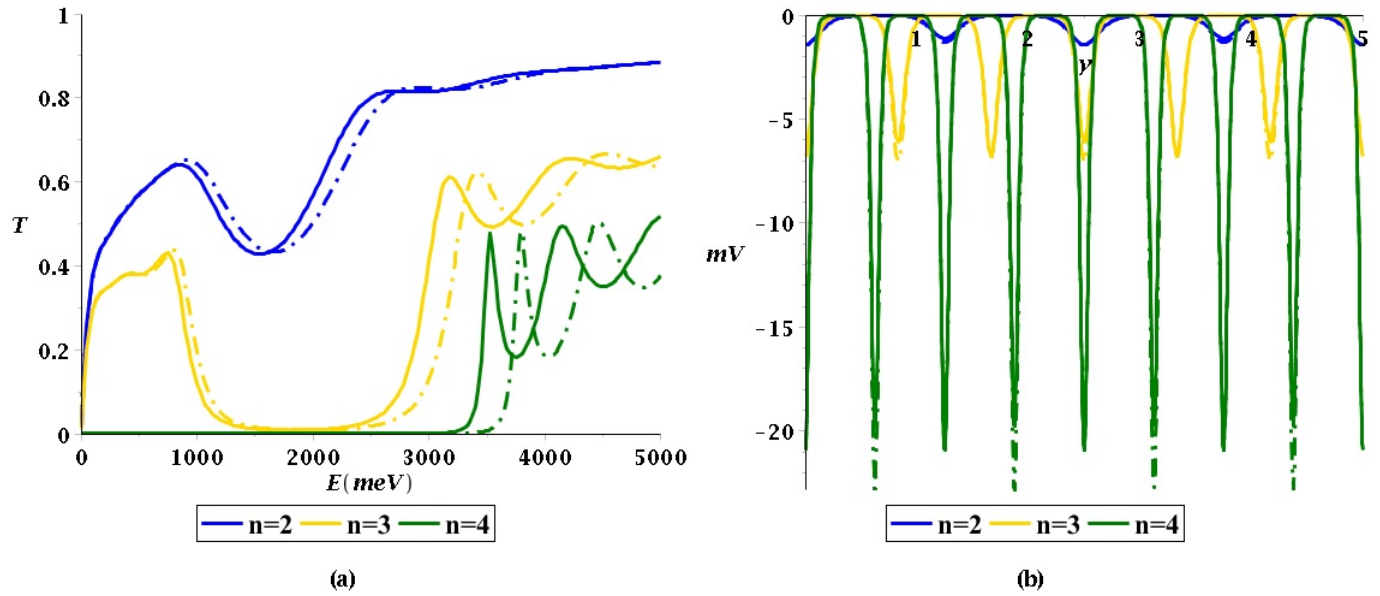


Figura 3.9: (a) Transmitância; (b) o potencial geométrico para $n = 2, 3, 4$ e $\epsilon = 0.2$.

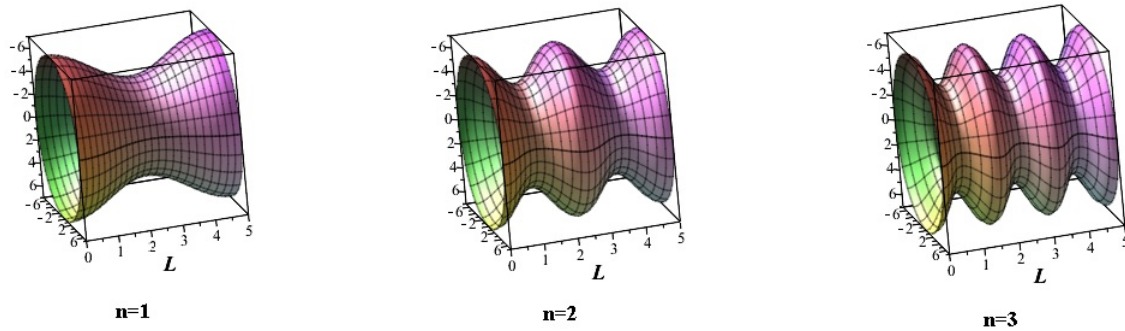


Figura 3.10: Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1, n = 2$ e $n = 3$, respectivamente.

mitância como pode ser visto na figura 3.11 (a). E além disso, corrige a largura do *gap* de energia, como mostra a figura 3.12 (a).

Em contraste com o caso das ondulações, em que ϵ aumenta, e o potencial geométrico torna-se mais profundo, isso se inverte no caso da compressão. À medida que o nanotubo diminui, o valor de ϵ aumenta, fazendo o potencial geométrico diminuir em relação ao caso da massa constante. Diferente do caso das ondulações, o *gap* de energia torna-se agora mais curto. Existe também outro importante resultado a ser apontado. Em [1], onde os nanotubos deformados considerados aqui são investigados com a massa efetiva constante, foi concluído que os nanotubos comprimidos induzem um potencial geométrico mais profundo comparado com o dos nanotubos ondulados. Como podemos ver em nosso resultados, a inclusão da

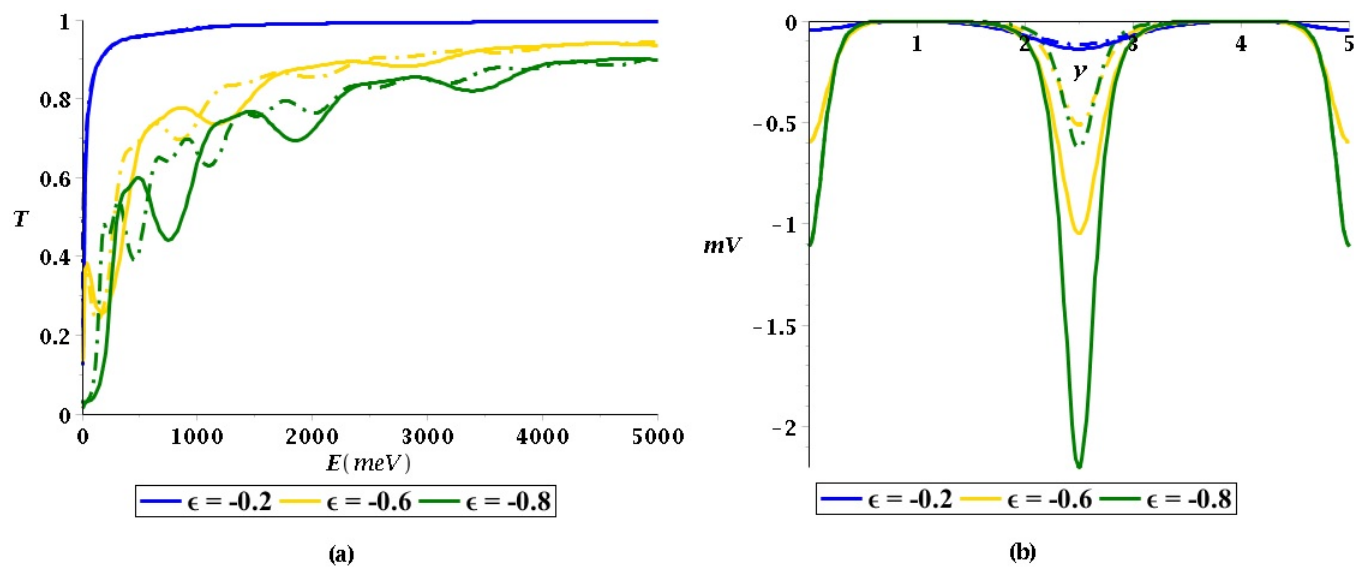


Figura 3.11: (a) Transmitância; (b) o potencial geométrico com $n = 1$ e $\epsilon = -0.2, -0.6, -0.8$.

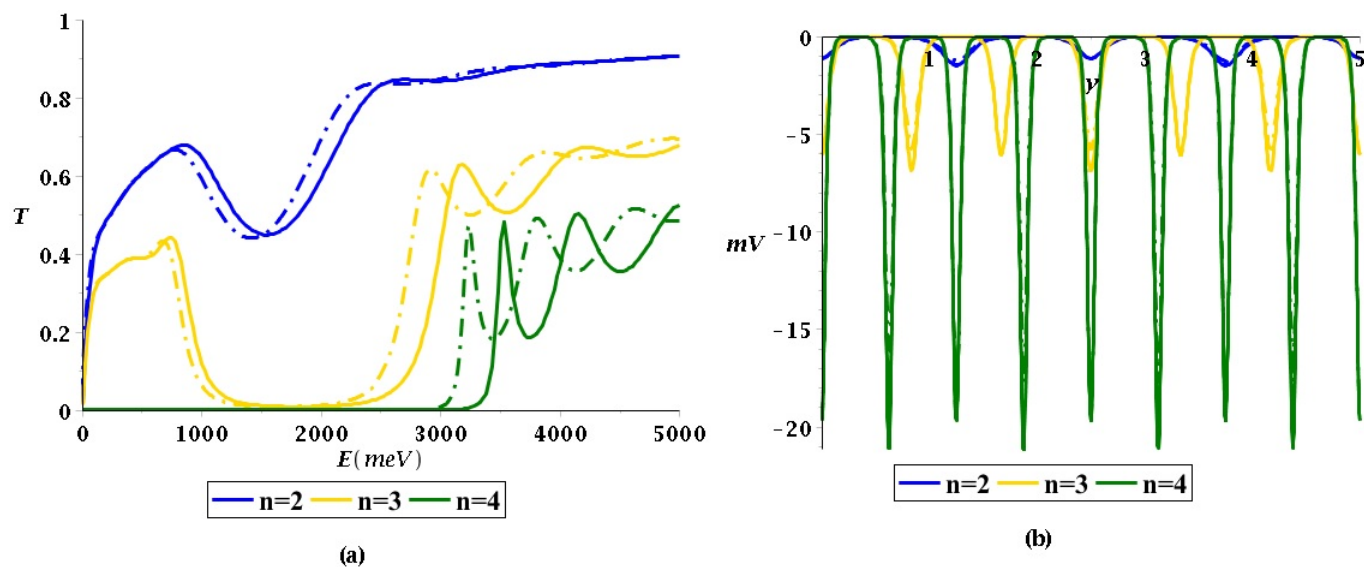


Figura 3.12: (a) Transmitância; (b) o potencial geométrico para $n = 2, 3, 4$ e $\epsilon = -0.2$.

massa efetiva dependente da posição revela que ocorre o oposto. Então, para induzir um potencial geométrico mais profundo, em vez de criar um nanotubo comprimido, como foi concluído em [1], deve-se incluir ondulações.

No próximo capítulo estudaremos os efeitos do campo magnético aplicado a essas superfícies de revolução, contudo sem a inclusão da massa dependente da posição. Partiremos da equação de Schrödinger desenvolvida por [3] para partículas confinadas a superfícies curvilíneas na presença de campos eletromagnéticos. Veremos que a inclusão de um campo magnético modifica drasticamente a transmitância .

Capítulo 4

Influência do campo magnético no transporte eletrônico em nanotubos deformados

Com o desenvolvimento experimental na construção de sistemas bidimensionais curvos, como nanotubos de carbono e fulerenos, existe a necessidade do entendimento da dinâmica eletrônica nesses sistemas. A aplicação de campos externos a esses conjuntos é apenas uma consequência desses estudos.

De uma maneira geral, a investigação de novos efeitos físicos por meio de aplicação de campos externos em diferentes sistemas é bem intensa, e nos fornecem diferentes fenômenos. Para os sistemas bidimensionais, podemos destacar as oscilações Aharonov-Bohm [13], a formação de níveis de Landau [11], e o efeito Hall quântico [14].

Aqui estudaremos os efeitos no transporte eletrônico em nanotubos com a aplicação de um campo magnético paralelo ao seu eixo de simetria. Para isso, vamos descrever o procedimento realizado por Ferrari e Cuoghi [3], que obtiveram a equação de Schrödinger para partículas carregadas sem spin imersas em campos elétrico e magnético.

Esse procedimento levou em consideração o método apresentado por da Costa, capítulo 2, para o confinamento da partícula a uma superfície. O campo eletromagnético é introduzido via quadripotencial e foi encontrado que não existe acoplamento entre os campos e a

curvatura da superfície. Com esse não acomplamento e dada uma escolha apropriada de gauge, podemos realizar uma separação da equação de Schrödinger em duas equações, uma para a dinâmica superficial e outra para a transversal.

Na próxima seção iremos apresentar tal procedimento seguindo a sequência desenvolvida pelos autores.

4.1 Equação de Schrödinger para uma partícula em superfície curva na presença de um campo eletromagnético

Inicialmente é preciso escrever a equação de Schrödinger usando as derivadas espaciais covariantes e com o mínimo acoplamento com o quadripotencial. O quadripotencial é uma função vetorial relativística, do qual o campo eletromagnético pode ser obtido. A sua primeira componente é o potencial escalar elétrico V e as outras 3 componentes são do potencial vetor \vec{A} .

Aqui vamos utilizar as componentes dos tensores covariante e contravariante, além da convenção da soma de Einstein. A derivada covariante de gauge é definida como

$$D_j = \nabla_j - \frac{iQ}{\hbar} A_j, \quad (4.1)$$

onde Q é a carga da partícula e A_j é a componente covariante do potencial vetor. Já a derivada covariante ∇_j é dada por

$$\nabla_j v^i = \partial_j v^i + \Gamma_{ji}^k v^k, \quad (4.2)$$

em que v^i são as componentes contravariantes de um campo vetorial tridimensional, Γ_{jk}^i são os símbolos de Christoffel, e ∂_j é a derivada em relação à variável espacial q_j . Com isso, temos a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} G^{ij} D_i D_j \psi + QV\psi, \quad (4.3)$$

onde G^{ij} é o tensor métrico inverso. Como já visto, é esse tensor, junto com a segunda forma fundamental, que carrega a informação sobre a geometria do espaço.

Definimos agora a derivada covariante de gauge para o tempo como

$$D_0 = \partial_t - \frac{iQ}{\hbar}A_0, \quad (4.4)$$

em que fizemos $A_0 = -V$. Da equação 4.3, passando o termo do potencial para o outro membro e colocando $i\hbar$ em evidência temos:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{iQ}{\hbar}A_0 \right] \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}G^{ij}D_iD_j\psi \\ i\hbar D_0\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}G^{ij}D_iD_j\psi. \end{aligned} \quad (4.5)$$

A invariância de gauge pode ser demonstrada com relação às seguintes transformações de gauge:

$$A_j \rightarrow A'_j = A_j + \partial_j\gamma; \quad A_0 \rightarrow A'_0 = A_0 + \partial_t\gamma; \quad \psi \rightarrow \psi' = e^{iQ\gamma/\hbar}, \quad (4.6)$$

onde γ é uma função escalar. Substituindo a equação 4.1 na 4.5 ficamos com:

$$i\hbar D_0\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}G^{ij} \left[\left(\nabla_i - \frac{iQ}{\hbar}A_i \right) \left(\nabla_j - \frac{iQ}{\hbar}A_j \right) \right] \psi. \quad (4.7)$$

Aplicando cada termo entre parênteses em ψ nos leva a

$$\begin{aligned} i\hbar D_0\psi &= \frac{1}{2m}[-\hbar^2 \nabla_i (G^{ij} \nabla_j \psi) + iQ\hbar G^{ij}(\nabla_i A_j)\psi + iQ\hbar G^{ij} A_j(\nabla_i \psi) \\ &\quad + iQ\hbar G^{ij} A_i(\nabla_j \psi) + Q^2 G^{ij} A_i A_j \psi], \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde os termos $iQ\hbar G^{ij} A_j(\nabla_i \psi)$ e $iQ\hbar G^{ij} A_i(\nabla_j \psi)$ são considerados iguais, uma vez que, i e j são apenas índices e podemos mudá-los. Substituindo a derivada covariante definida na equação 4.2, e com um pouco de álgebra chegamos a:

$$i\hbar D_0\psi = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{G}} \partial_i (\sqrt{G} G^{ij} \partial_j \psi) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{G}} \partial_i (\sqrt{G} G^{ij} A_j) \psi + 2iQ\hbar G^{ij} A_j \partial_i \psi + Q^2 G^{ij} A_i A_j \psi \right], \quad (4.9)$$

onde $G = \det(G_{ij})$. Essa é a equação de Schrödinger covariante para qualquer sistema de coordenadas curvilíneas tridimensionais, quando os campos elétrico e magnético são aplicados. Vale destacar que o gauge foi escrito de uma maneira geral e $\vec{A} = (A_1, A_2, A_3)$ é válida para qualquer gauge.

4.1.1 Aplicação do procedimento de da Costa

Com a equação 4.9, precisamos agora descrever a nossa superfície antes de aplicar o procedimento de da Costa. Seguindo a parametrização descrita por da Costa [10], a superfície S é dada por $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$, onde \vec{r} é o vetor de um ponto arbitrário na superfície. Já o espaço tridimensional na vizinhança de S pode ser parametrizado como

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \vec{n}(q_1, q_2), \quad (4.10)$$

onde \vec{n} é o vetor normal a superfície. Iremos introduzir os índices a e b para indicar os parâmetros da superfície, os quais assumem os valores 1 e 2.

A relação entre o tensor métrico tridimensional G_{ij} e o tensor métrico bidimensional g_{ab} induzido é dado por:

$$G_{ab} = g_{ab} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ab} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ab} q_3^2; \quad G_{a3} = G_{3a} = 0; \quad G_{33} = 1, \quad (4.11)$$

onde

$$g_{ab} = \partial_a \vec{r} \partial_b \vec{r}, \quad (4.12)$$

e α_{ab} é a matriz de curvatura de Weingarten para a superfície. Uma vez que realizamos a decomposição através das equações anteriores, podemos agora separar a equação de Schrödinger em duas partes. Uma contendo as coordenadas da superfície a e $b = 1, 2$, e a segunda contendo a coordenada normal à superfície.

Aplicando o procedimento de da Costa, introduzimos um potencial $V_\lambda(q_3)$ que confina a partícula à superfície, onde λ é o parâmetro que mensura a intensidade do confinamento. O objetivo desse procedimento é obter um função de onda que dependa apenas de q_1 e q_2 , que são as coordenadas que formam a superfície. Com isso, introduzimos uma nova função de onda

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_s(q_1, q_2) \chi_n(q_3), \quad (4.13)$$

onde o índice s indica as componentes superficiais, e n a componente normal à superfície. Vimos no capítulo 2 que a condição de conservação da norma é realizada através da relação:

$$\psi(q_1, q_2, q_3) = [1 + \text{Tr}(\alpha)q_3 + \det(\alpha)q_3^2]^{-1/2} \chi(q_1, q_2, q_3). \quad (4.14)$$

O potencial confinante $V_\lambda(q_3)$ faz com que a função de onda esteja presa na superfície, isso significa que a função de onda só será diferente de zero em uma vizinhança muito próxima de S . Isso nos permite aplicar o limite $q_3 \rightarrow 0$ na equação de Schrödinger. Com todas essas considerações podemos chegar em:

$$\begin{aligned}
 i\hbar D_0 \chi = & \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g} g^{ab} \partial_b \chi) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g} g^{ab} A_b \chi) + 2iQ\hbar g^{ab} A_a \partial_b \chi \right. \\
 & + Q^2 (g^{ab} A_a A_b + (A_3)^2) \chi - \hbar^2 (\partial_3)^2 \chi + iQ\hbar (\partial_3 A_3) \chi \\
 & \left. + 2iQ\hbar A_3 (\partial_3 \chi) - \hbar^2 \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha) \right]^2 - \det(\alpha) \right) \chi \right] + V_\lambda(q_3) \chi, \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

onde $g = \det(g_{ab})$, e temos que todas as componentes de A , assim como as derivadas, são calculadas em $q_3 = 0$.

Note que na equação 4.15 não existem termos misturados de A_j ($j = 1, 2, 3$) com termos da matriz curvatura α_{ab} . Isso evidencia o não acoplamento do campo magnético com a curvatura da superfície, independentemente da forma da superfície, do campo magnético, e do gauge. Temos que o último termo da equação 4.15 é o já conhecido potencial geométrico:

$$V_{geo}(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha) \right]^2 - \det(\alpha) \right), \quad (4.16)$$

onde o primeiro termo é o quadrado da curvatura média e o segundo é a curvatura gaussiana.

Definindo um novo tensor métrico \tilde{G} como

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

podemos re-escrever a equação 4.15 de forma compacta:

$$i\hbar D_0 \chi = \frac{1}{2m} \tilde{G}^{ij} \tilde{D}_i \tilde{D}_j \chi + V_{geo} \chi + V_\lambda(q_3) \chi. \quad (4.18)$$

Temos que a separabilidade da equação 4.15 em uma equação a depender apenas da componente normal (q_3) e outra a depender das componentes superficiais (q_1, q_2) até agora não é possível. O termo $[A_3(q_1, q_2, 0) \partial_3 \chi]$ acopla a dinâmica ao longo de q_3 com a dinâmica da superfície S . Uma vez que o gauge é invariante, podemos escolher um gauge que cancele a

componente A_3 do potencial vetor, eliminando assim o termo acoplado. A partir da equação 4.6 a escolha mais adequada para γ é:

$$\gamma(q_1, q_2, q_3) = - \int_0^{q_3} A_3(q_1, q_2, z) dz. \quad (4.19)$$

É obtido $A'_3 = 0$, $\partial_3 A'_3 = 0$ quando fazemos o limite que $q_3 \rightarrow 0$. Temos que as componentes A_1 e A_2 permanecem inalteradas. Assim, nós podemos realizar a separação inicialmente proposta da equação de Schrödinger em duas equações:

$$i\hbar\partial_t\chi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_3)^2\chi_n + V_\lambda(q_3)\chi_n, \quad (4.20)$$

$$i\hbar\partial_t\chi_s = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b\chi_s) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}A_b)\chi_s + 2iQ\hbar g^{ab}A_a\partial_b\chi_s + \right. \\ \left. + Q^2 g^{ab}A_aA_b\chi_s \right] + V_{geo}\chi_s + QV\chi_s. \quad (4.21)$$

A equação 4.20 é a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula confinada a superfície pelo potencial V_λ . Já a equação 4.21 é a equação de Schrödinger que descreve a dinâmica de uma partícula ligada à superfície sobre efeitos dos campos elétricos e magnéticos. Essas equações demonstram que o desacoplamento da dinâmica tangencial e transversal na superfície é realizada com uma apropriada escolha de gauge.

Na próxima seção construiremos a equação 4.21 para uma superfície com simetria cilíndrica, uma vez que, estamos interessados em nanotubos. Em [3] se encontram também a equação 4.21 escrita para coordenadas esféricas e toroidais.

4.1.2 Aplicação para superfície cilíndrica

Para um dado sistema de coordenadas (θ, q_2, ρ) , onde nossa coordenada q_2 é a coordenada ao longo do eixo de revolução, e θ a componente angular. Um campo uniforme \vec{B} aplicado a um cilindro de raio ρ pode sempre ser decomposto em uma componente B_0 na direção de q_2 , paralela ao eixo do cilindro, e uma componente B_1 perpendicular ao eixo ρ em $\theta = 0$, como mostra a figura 4.1.

Para determinar a equação 4.21 para coordenadas cilíndricas precisamos antes calcular o potencial vetor $\vec{A} = (A_\theta, A_{q_2}, A_\rho)$ adequado. Sabendo que o campo magnético tem como

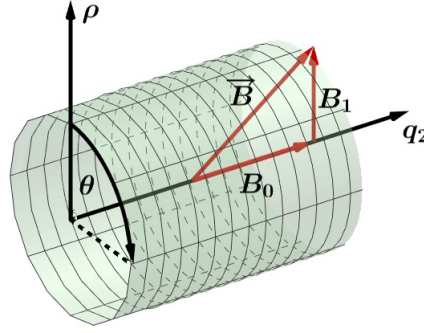


Figura 4.1: Decomposição do campo magnético.

componentes $\vec{B} = (B_\theta, B_{q_2}, B_\rho) = (0, \frac{3}{2}\rho B_0, B_1 \cos(\theta))$, podemos calcular o potencial vetor \vec{A} pela equação

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (4.22)$$

O rotacional em coordenadas cilíndricas de \vec{A} é dado por:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} \hat{\rho} & \rho \hat{\theta} & \hat{q}_2 \\ \partial_\rho & \partial_\theta & \partial_{q_2} \\ A_\rho & \rho A_\theta & A_{q_2} \end{bmatrix}. \quad (4.23)$$

Pela equação 4.19 temos que a componente do potencial vetor que corresponde à componente normal à superfície A_ρ é nula. Calculando o rotacional e igualando cada componente, temos o seguinte sistema:

$$\partial_\rho A_{q_2} = 0, \quad (4.24)$$

$$\frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho A_\theta) = \frac{3}{2} \rho B_0 \quad (4.25)$$

$$\partial_\theta A_{q_2} - \partial_{q_2} (\rho A_\theta) = \rho B_1 \cos(\theta). \quad (4.26)$$

Resolvendo primeiro a equação 4.25, o que consiste apenas passar o ρ para o membro direito da equação e integrar os dois lados em relação a ρ , ficamos com:

$$A_\theta = \frac{1}{2} \rho^2 B_0. \quad (4.27)$$

Temos que o termo $\partial_{q_2} (\rho A_\theta)$ da equação 4.26 não depende de θ , quando integramos toda a equação em relação a θ , esse termo sai da integral e surge um termo θ multiplicando-o.

Como nosso problema possui simetria angular em θ e translacional em q_2 , isso nos leva a

$$A_{q_2} = \rho B_1 \text{sen}(\theta). \quad (4.28)$$

O que é consistente com a equação 4.24 para $\theta = 0$. Portanto, nosso potencial vetor é:

$$\vec{A} = \left(\frac{1}{2} \rho^2 B_0, \rho B_1 \text{sen}(\theta), 0 \right). \quad (4.29)$$

Como já calculado no capítulo 2, dada a equação 2.29 para coordenadas cilíndricas, o tensor métrico g_{ab} e o tensor inverso g^{ab} são dados por:

$$g_{ab} = \begin{pmatrix} \rho(q_2)^2 & 0 \\ 0 & 1 + \rho'(q_2)^2 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

$$g^{ab} = \begin{pmatrix} (\rho(q_2)^2)^{-1} & 0 \\ 0 & (1 + \rho'(q_2)^2)^{-1} \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

onde $\rho' = d\rho/dq_2$. E temos também que

$$\sqrt{g} = \sqrt{\det g} = \rho(q_2) \sqrt{1 + \rho'(q_2)^2}. \quad (4.32)$$

Temos agora que os índices são $a = q_2$ e $b = \theta$. Dessa maneira, χ_s torna-se agora uma função de q_2 e θ . Substituindo as equações 4.31 e 4.32 em 4.21 ficamos com:

$$\begin{aligned} E\chi_s = & \frac{1}{2m} \left[- \frac{\hbar^2}{\rho(1 + \rho'^2)^{1/2}} \partial_{q_2} \left(\frac{\rho}{(1 + \rho'^2)^{1/2}} \partial_{q_2} \chi_s \right) + \frac{iQ\hbar}{\rho(1 + \rho'^2)^{1/2}} \partial_{q_2} \left(\frac{\rho}{(1 + \rho'^2)^{1/2}} A_{q_2} \right) \chi_s \right. \\ & - \frac{\hbar^2}{\rho(1 + \rho'^2)^{1/2}} \partial_\theta \left(\frac{(1 + \rho'^2)^{1/2}}{\rho} \partial_\theta \chi_s \right) + \frac{iQ\hbar}{\rho(1 + \rho'^2)^{1/2}} \partial_\theta \left(\frac{(1 + \rho'^2)^{1/2}}{\rho} A_\theta \right) \chi_s \\ & \left. + \frac{2iQ\hbar A_{q_2}}{(1 + \rho'^2)} \partial_{q_2} \chi_s + \frac{Q^2 A_{q_2}^2 \chi_s}{(1 + \rho'^2)} + \frac{2iQ\hbar A_\theta}{\rho^2} \partial_\theta \chi_s + \frac{Q^2 A_\theta^2 \chi_s}{\rho^2} + V_{geo} \chi_s + QV \chi_s, \right. \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde, por questões de simplicidade, suprimimos a dependência de ρ em relação q_2 . Além disso, não levamos em conta o caráter temporal da equação 4.21.

A 4.33 é a equação geral para uma superfície cilíndrica com campos magnético e elétrico em qualquer direção. Essa equação torna-se bastante complicada de se resolver para um campo magnético em uma direção qualquer.

Em [21] essa equação é resolvida para um campo magnético transversal ao eixo de um cilindro reto (nesse caso, ρ é constante). Para o nosso caso, em que estamos interessados

em nanotubos deformados, não podemos considerar o ρ constante, e isso nos fornece uma dose a mais de dificuldade no problema. Porém, quando consideramos $V = 0$ (ausência de campo elétrico) e com o campo magnético apenas na direção de q_2 , a equação 4.33 torna-se separável. Essa orientação do campo magnético em nada afetaria a dinâmica de uma partícula carregada se o raio do tubo estivesse constante, contudo para o nosso caso o raio do tubo não é constante, e partículas carregadas são afetadas pelo campo magnético quando passam pela deformação. Na figura 4.2 (a) vemos um esquema do problema tratado aqui com o campo magnético paralelo ao eixo de q_2 aplicado na superfície deformada, na parte (b) podemos verificar a intensidade da força magnética atuando em um elétron (fora de escala na figura) em cada posição do nanotubo.

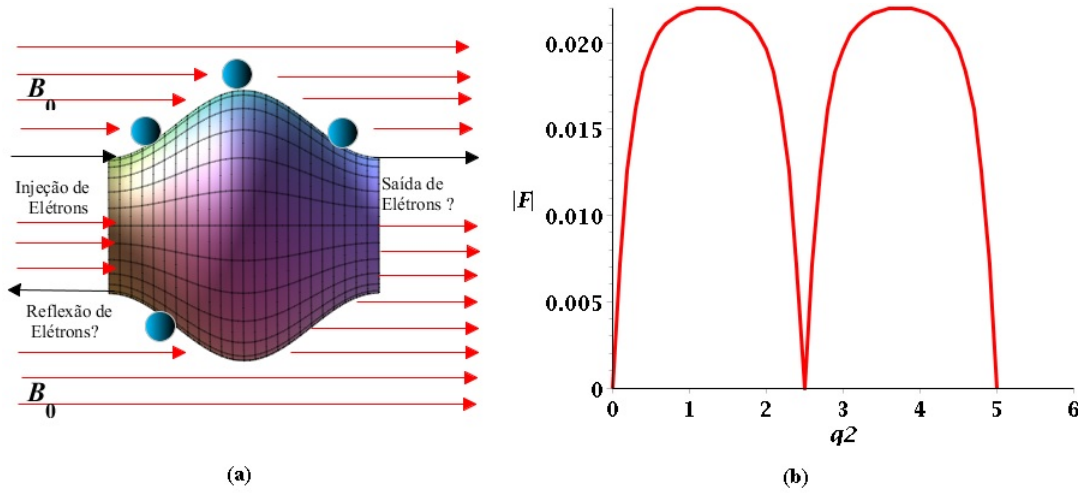


Figura 4.2: (a) Superfície deformada; (b) força Magnética ao longo da deformação.

Com essa escolha, temos que $B_1 = 0$ de modo que o potencial vetor torna-se:

$$\vec{A} = \left(\frac{1}{2} \rho^2 B_0, 0, 0 \right). \quad (4.34)$$

Com esse potencial vetor, e realizando as derivadas até então possíveis, a equação 4.33 torna-se:

$$E\chi_s = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{(1 + \rho'^2)} \partial_{q_2}^2 \chi_s - \frac{\hbar^2 \rho'}{\rho(1 + \rho'^2)} \left(1 - \frac{\rho \rho''}{(1 + \rho'^2)} \right) \partial_{q_2} \chi_s - \frac{\hbar^2}{\rho^2} \partial_\theta^2 \chi_s + iQ\hbar B_0 \partial_\theta \chi_s + \frac{Q^2 \rho^2 B_0^2}{4} \chi_s \right] V_{geo} \chi_s. \quad (4.35)$$

Temos que a equação 4.35 é uma equação diferencial separável. Assim, supomos que a solução seja do tipo:

$$\chi_s(q_2, \theta) = \chi(q_2)\chi(\theta), \quad (4.36)$$

que consiste no produto de duas funções, uma a depender apenas de q_2 e a outra apenas de θ . Ao substituirmos tal solução, teremos que a parte angular corresponde a uma equação diferencial ordinária (E.D.O) do tipo:

$$\partial_\theta^2 \chi(\theta) - il\partial_\theta \chi(\theta) + 2l^2 \chi(\theta) = 0. \quad (4.37)$$

As soluções dessa E.D.O. são as autofunções do momento angular $l\hbar$ ao longo do eixo q_2 , e são do tipo:

$$\chi(\theta) = e^{i\theta}. \quad (4.38)$$

Já a parte axial pode agora ser escrita da seguinte maneira:

$$\partial_{q_2}^2 \chi_{q_2} + F\partial_{q_2} \chi_{q_2} + G \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{geo}) - \frac{l^2}{\rho^2} - \frac{QB_0 l}{\hbar} - \frac{Q^2 \rho^2 B_0^2}{4\hbar^2} \right] \chi_{q_2} = 0, \quad (4.39)$$

onde

$$G \equiv 1 + \rho'^2 \quad \text{e} \quad F \equiv \frac{\rho'}{\rho} \left[1 - \frac{\rho\rho''}{(1 + \rho'^2)} \right]. \quad (4.40)$$

Note que a equação 4.39 é do mesmo tipo que a 3.46

$$\chi_{q_2}'' + V_1(q_2)\chi_{q_2}' + V_2(q_2)\chi_{q_2} = 0, \quad (4.41)$$

e podemos utilizar a mesma metodologia realizada no capítulo 3 para solucioná-la, com o mesmo modelo de nanotubo. Note também que a equação 4.39 torna-se igual à equação 8 de [1] quando os campos são nulos. Utilizando a mesma mudança de variável do capítulo 3

$$\chi_{q_2} = \phi(q_2)\lambda(q_2), \quad (4.42)$$

na equação 4.39, encontramos a seguinte equação

$$\phi''(q_2) + \left(-\frac{1}{4}V_1^2(q_2) - \frac{1}{2}V_1'(q_2) + V_2(q_2) \right) \phi(q_2) = 0, \quad (4.43)$$

que é idêntica em forma a 3.53, contudo agora temos

$$V_1 = F, \quad (4.44)$$

e

$$V_2 = G \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_{geo} - \frac{l^2}{\rho^2} - \frac{QB_0 l}{\hbar} - \frac{Q^2 \rho^2 B_0^2}{4\hbar^2} \right] \quad (4.45)$$

sendo diferentes dos de lá. Aqui, chamaremos o termo entre parênteses de potencial efetivo

$$V_{efetivo} = \left(-\frac{1}{4} V_1^2(q_2) - \frac{1}{2} V_1'(q_2) + V_2(q_2) \right). \quad (4.46)$$

Mais uma vez, estamos interessados na transmitância devido a deformação do tubo e à influência do campo magnético. Nós consideramos a injeção de elétrons de energia E_k vindo da parte negativa do eixo q_2 , onde consideramos a origem começando no início da deformação. Assim, temos que as soluções fora da deformação são ondas planas

$$\begin{aligned} \chi_{q_2} &= a_0 e^{ik_0 q_2} + b_0 e^{-ik_0 q_2} && \text{para } q_2 \leq 0 \\ &= a_L e^{-ik_L(q_2-L)} + b_L e^{ik_L(q_2-L)} && \text{para } q_2 \geq L. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Porém, temos agora que os vetores de onda incidente e o transmitido, k_0 e k_L são iguais, uma vez que aqui iremos considerar deformações começando e terminando com o mesmo q_2

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k - V_{geo}(0))} = k_L, \quad (4.48)$$

Perceba que $V_1(q_2) = 0$ para q_2 fora do intervalo $0 < q_2 < L$, o que torna as equações 4.41 e 4.43 idênticas. Então, a equação 4.47 é também válida para $\phi(q_2)$, e assim temos que $\chi_{q_2}(0) = \phi(0)$, tal como $\chi_{q_2}(L) = \phi(L)$. Da mesma forma que no capítulo anterior, temos que a reflexão e a transmissão não dependem de $\lambda(q_2)$ e podem ser obtidas a partir de $\phi(q_2)$.

Usamos também as mesmas condições de normalização, $a_0 = 1$ e $a_L = 0$, isto é, consideramos apenas ondas saindo na região $q_2 \geq 0$. Com as condições mencionadas, temos que a transmissão e a reflexão são dadas por:

$$T = \frac{k_L}{k_0} |\phi(L)|^2, \quad (4.49)$$

$$R = |\phi(0) - 1|^2. \quad (4.50)$$

Assim, o problema se reduz a encontrar $\phi(0)$ e $\phi(L)$ para resolver o acoplamento diferencial e as equações algébricas (equação 4.43 e as condições de contorno) no intervalo $0 \leq q_2 \leq L$.

Com as equações acima, nós implementamos um código no MAPLE (Apêndice B) para encontrar, para cada energia injetada, $\phi(0)$ e $\phi(L)$ e, conseqüentemente, a transmissão e reflexão pelas equações 4.49 e 4.50 respectivamente. Usamos um sistema de unidades mistas em que temos as energias incidentes em meV , e as distâncias em nm . Isso nos leva a massa do elétron livre sendo $m_e = 5.68 \times 10^{-27} meV.s^2/nm^2$ e a constante de Planck a $\hbar = 6.58 \times 10^{-13} meV.s$. Para as unidades de campo magnético nós usamos a unidade em $meV.s/C.nm^2$.

Na próxima seção iremos apresentar nossos resultados com a presença apenas do campo magnético. Onde faremos uma comparação entre os casos com e sem campo magnético. Além disso, testamos a influência da variação do campo magnético para diferentes formas de nanotubos.

4.2 Resultados

Nesta seção iremos apresentar os resultados obtidos devido a presença do campo magnético comparando com os casos sem o campo magnético. Mostraremos também as mudanças causadas na transmitância com a variação da intensidade desse campo para diversas deformações de tubos. A criação da deformação do nanotubo é realizada da mesma maneira que no capítulo 3,

$$\rho(q_2) = R \pm \frac{R\epsilon}{2} \left[1 - \cos \left(2 \frac{n\pi q_2}{L} \right) \right], \quad (4.51)$$

onde R é o raio inicial e final do nanotubo, ϵ nos fornece a deformação da superfície, e n é o número de ondulações ou compressões.

Por possuírem raios muito pequenos os nanotubos de carbono não permitem significativos efeitos para campos magnéticos acessíveis experimentalmente. Porém, efeitos induzidos pelo campo magnético podem ser importantes em nanotubos de carbono de múltiplas paredes, onde os raios são da ordem de dezenas de nanômetro e um campo de dezenas de Tesla é suficiente para ver efeitos no *gap* da banda de energia [22] e [23]. Dessa forma, para a dimensão do nanotubo modelado aqui é necessário utilizar um campo magnético bastante intenso.

Apresentaremos primeiro alguns resultados comparativos em casos que queremos chamar

a atenção para a influência do campo magnético aplicado paralelamente na transmitância. A figura 4.3 e 4.4 mostram na parte (b) a transmitância pela energia incidente e (c) o potencial efetivo, com (linha vermelha) e sem (linha azul) a influência do campo magnético, onde $B_0 = 8.9 \times 10^6 \text{meV.s/C.nm}^2$. Podemos perceber claramente uma sensibilidade na introdução do

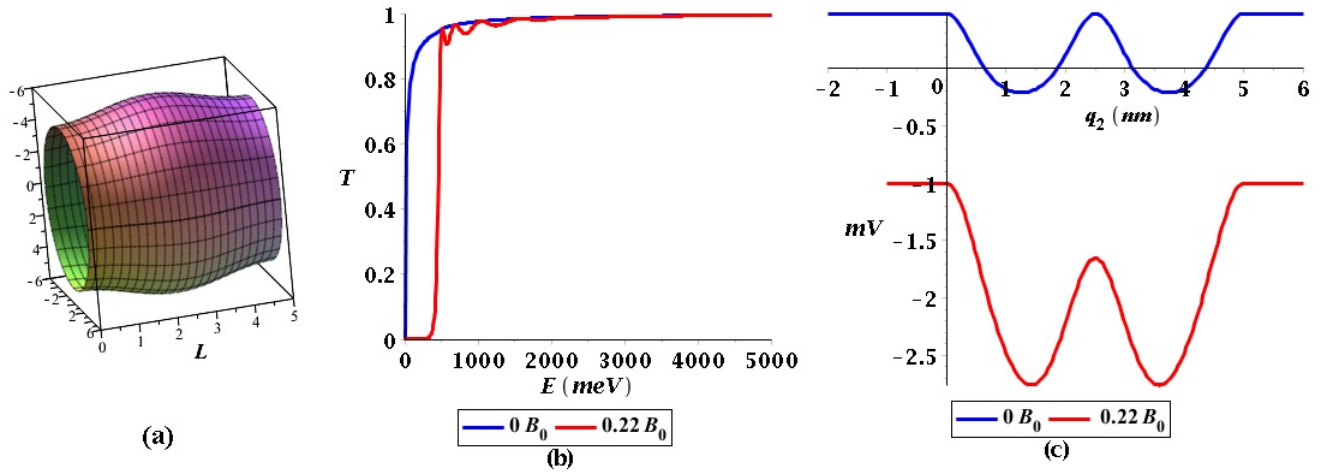


Figura 4.3: (a) Tubo ($\epsilon = 0.2$), (b) a transmitância pela energia incidente (meV), e (c) o potencial efetivo (mV), com (vermelho) e sem (linha azul) a influência do campo magnético.

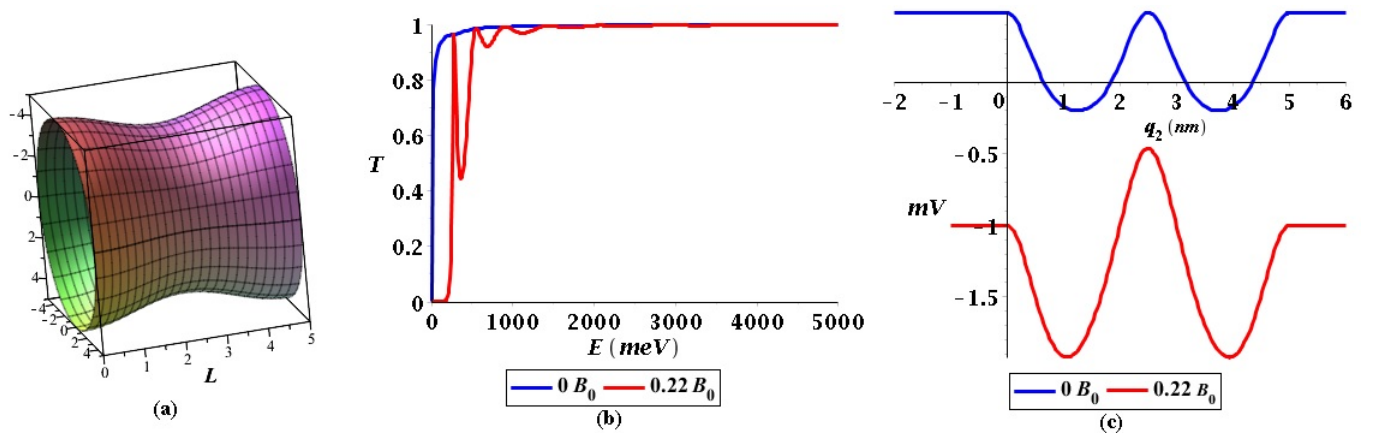


Figura 4.4: (a) Tubo ($\epsilon = -0.2$), (b) a transmitância pela energia incidente (meV), e (c) o potencial efetivo (mV), com (vermelho) e sem (linha azul) a influência do campo magnético.

campo magnético mesmo para uma deformação pequena ($\epsilon = -0.2$). Vemos nas partes (b) das figuras 4.3 e 4.4 um deslocamento para a direita das curvas de transmitância com o campo magnético em relação as curvas de transmitância sem o campo magnético. Os

deslocamentos das curvas se dão pelo fato de que agora os potenciais efetivos são mais profundos, fazendo com que elétrons menos energéticos sejam refletidos e não passem pela deformação, ou fiquem presos no potencial. Nota-se também o surgimento de picos de ressonância, que são correspondentes a estados quase ligados.

Esses são estados associados com um poço quântico onde uma partícula é primariamente confinada, mas possui uma probabilidade finita de tunelamento e escapar. No nanotubo, o potencial efetivo (que contém o potencial geométrico), se profundo o suficiente, podem existir semelhantes estados. Nos casos em que a energia do elétron coincide com a de um estado quase ligado ele tunela facilmente para dentro da região do potencial, e assim tunela para o lado oposto. Se o potencial torna-se profundo, os níveis de energia quase ligados mudam-se para baixo implicando uma mudança nos picos de ressonância para baixas energias. Assim como em [1] isso acontece aqui, porém mais intensamente para os casos em que o campo magnético se faz presente, devido à sua maior influência no potencial efetivo.

Não podemos comparar diretamente os nossos casos com [1] (sem campo magnético), uma vez que lá só existe o potencial geométrico, e aqui temos também a presença do potencial vetor. Para realizarmos tal análise precisamos olhar para o potencial efetivo nas partes (c) das figuras 4.3 e 4.4. Quando comparados os casos com e sem campo magnético, tanto para a ondulação, tanto para a depressão, podemos perceber que há um grande decréscimo no potencial efetivo, fazendo com que os vales sejam mais profundos, e os picos (em $q_2 = 2.5nm$) mais intensos. Isso favorece o acréscimo de estados quase ligados, e com isso o aumento de picos de ressonância na transmitância.

Temos que na equação 4.39 temos um termo repulsivo l^2/ρ^2 para o caso em que $l \neq 0$. Assim o efeito do termo centrífugo faz com que o poço de potencial fique mais raso e conseqüentemente reduza o número de estados quase ligados, e portanto reduz também os picos de ressonância na transmitância. Por isso, em nossos resultados consideramos apenas os casos do momento angular nulo ($l = 0$), que dá uma característica física mais geral do sistema.

Mostraremos a seguir alguns casos em que fixamos a geometria da superfície e variamos a intensidade do campo magnético. A figura 4.5 mostra os diferentes tipos de superfícies com $n = 1, 2, 3$ e $\epsilon = 0.4$. Já nas figuras 4.6, 4.7 e 4.8 temos a transmitância (a) e o potencial

efetivo (b).

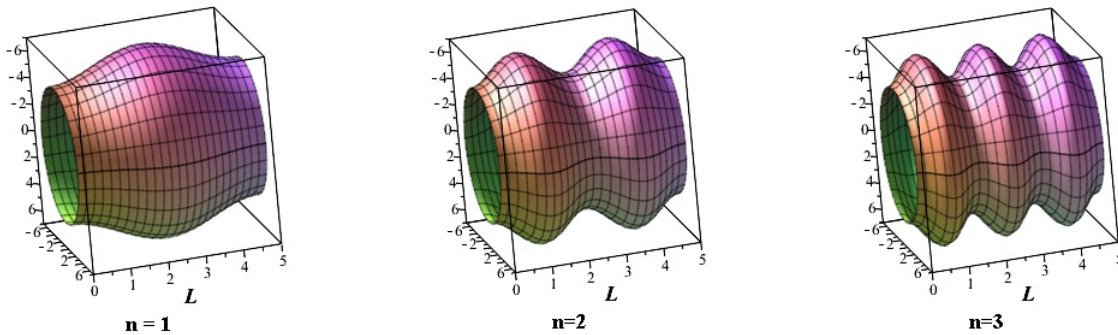


Figura 4.5: Tubos com $\epsilon = 0.4$ e $n = 1, n = 2$ e $n = 3$ respectivamente.

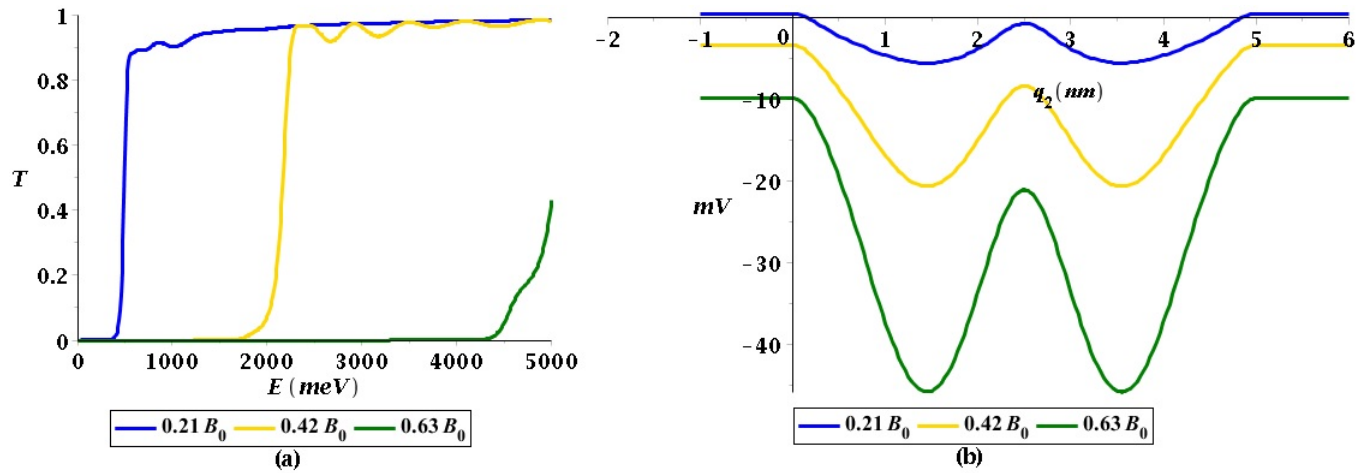


Figura 4.6: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 1$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

Obtivemos também os diferentes casos em que $\epsilon = -0.4$ e $n = 1, 2, 3$, variando o campo magnético. A figura 4.9 mostra os diferentes tubos e os resultados se encontram nas figuras 4.10, 4.11 e 4.12 em que (a) corresponde à transmitância e (b) ao potencial efetivo.

Comparando agora os casos da ondulação e da compressão variando o campo magnético percebemos uma grande diferença nas suas transmitâncias. Mais uma vez vamos observar o potencial efetivo. Olhando diretamente para esse potencial, podemos perceber que os vales no caso da ondulação são mais profundos do que o caso da compressão. Já quando olhamos para os picos em ($q_2 = 2.5$ para o caso mais simples) temos que seu pico é menos intenso. Essa diferença entre o pico e os vales estão diretamente ligadas na quantidade de estados

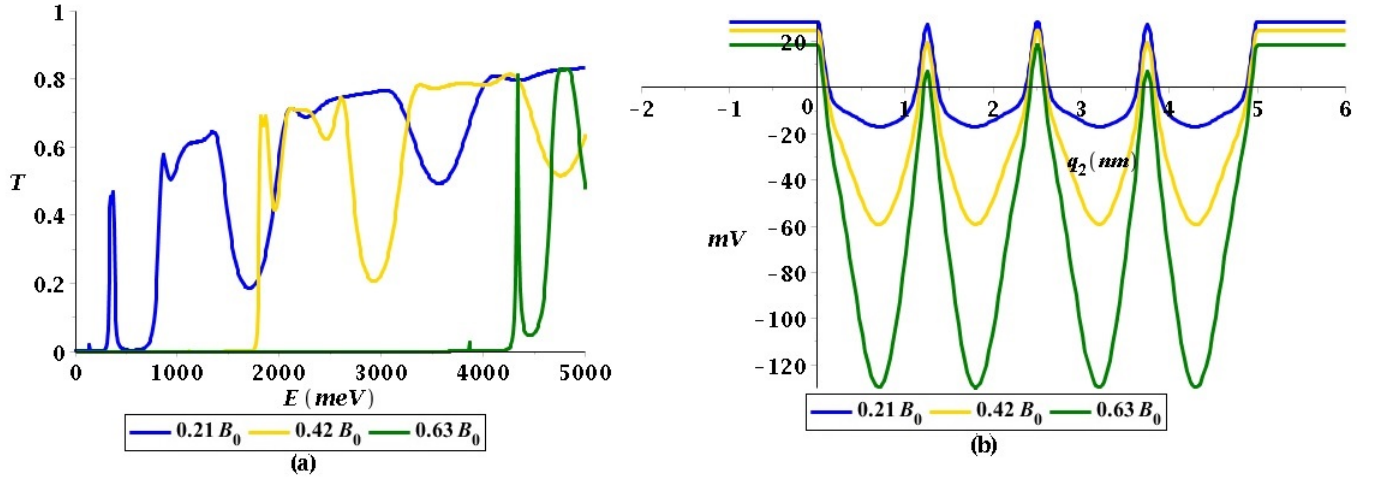


Figura 4.7: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 2$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

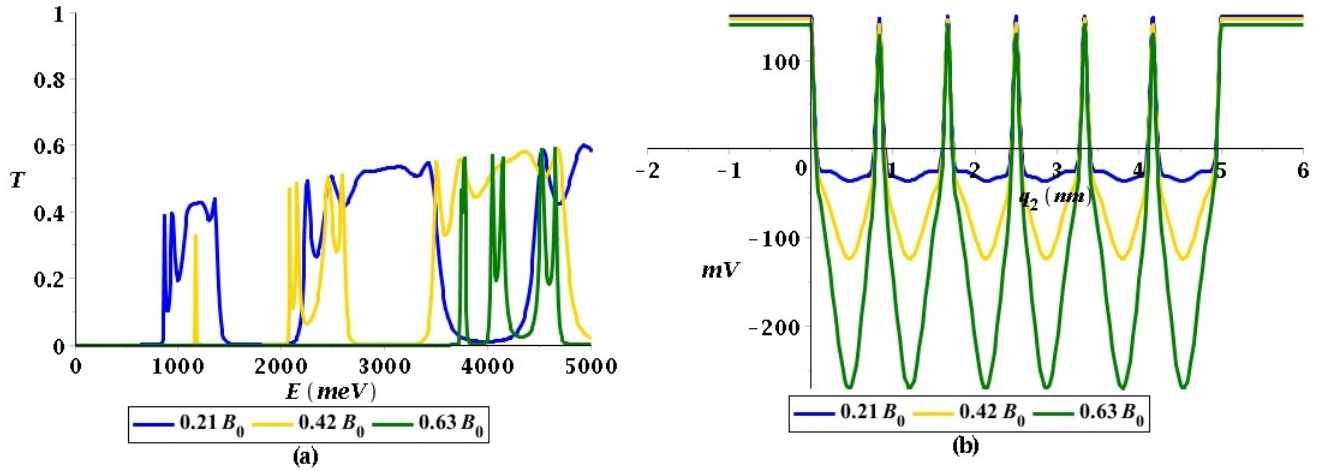


Figura 4.8: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 3$ e $\epsilon = 0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

quase ligados. Nota-se que as transmitâncias, em todos os gráficos apresentados nessa seção, possuem mais picos de ressonância no caso das compressões, pois a diferença entre os vales e os picos no potencial efetivo são maiores do que em relação a ondulação. Para entender isso vamos nos direcionar para os termos (i) V_{geo} e (ii) $Q^2 \rho^2 B_0^2 / 4\hbar^2$ da equação 4.39. Ambos os termos são negativos, e isso contribui para que o potencial efetivo seja negativo. Já no que diz respeito aos vales, o termo (ii) possui uma dependência com o raio do nanotubo e com a intensidade do campo magnético. Isso explica porque os vales na ondulação são mais

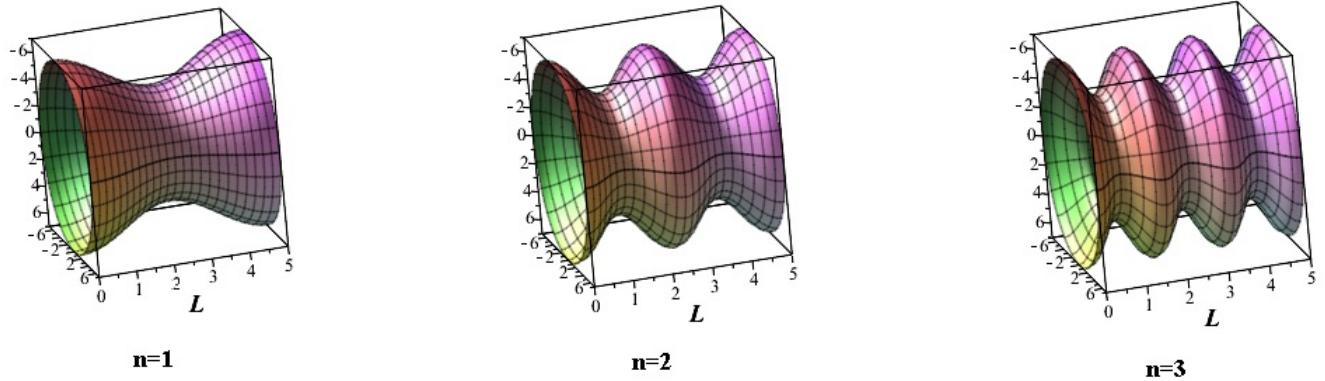


Figura 4.9: Tubos com $\epsilon = -0.4$ e $n = 1, n = 2$ e $n = 3$ respectivamente.

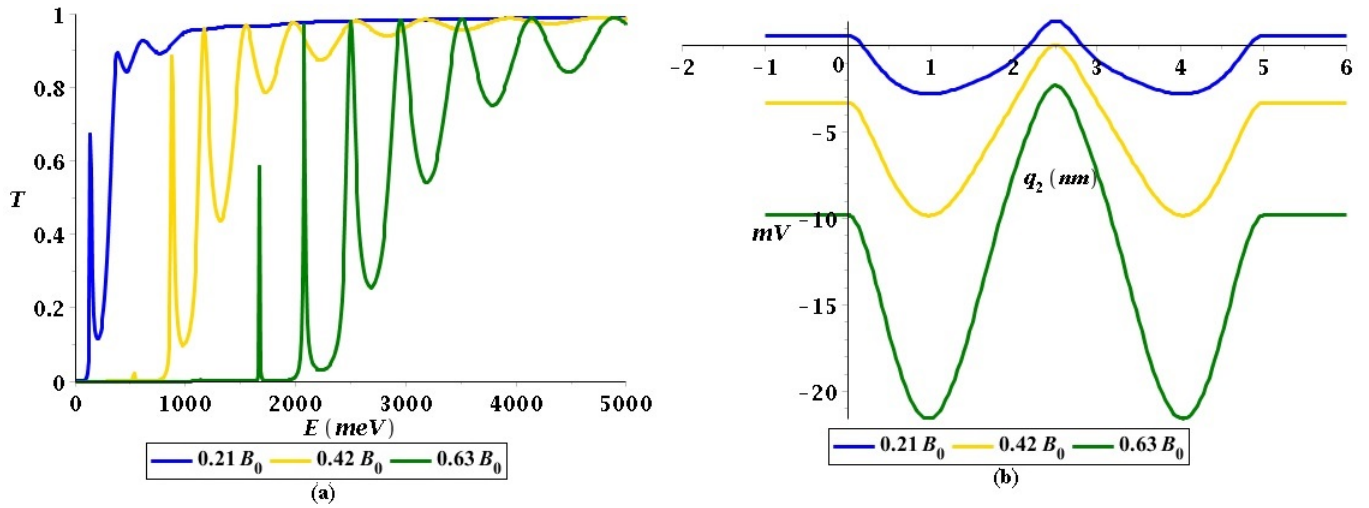


Figura 4.10: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 1$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

profundos em relação aos da compressão. Como o raio é maior na ondulação, mais intenso é esse termo e conseqüentemente mais profundos são os vales. É também desse termo a razão para o aumento da profundidade dos vales à medida em que aumentamos o campo magnético. No que corresponde aos picos no potencial efetivo, no caso da compressão o termo (i) possui curvatura gaussiana negativa, tornando-o negativo, e com isso mudando de sinal na equação 4.39. Que por sua vez, compete com o termo (ii), diferente do caso da ondulação, no qual (i) e (ii) possuem o mesmo sinal.

Como esperado, para todos os casos com campo magnético, surgem faixas de energia em que a transmitância é nula, essas faixas são chamadas de *gap*, essas são as faixas de energia

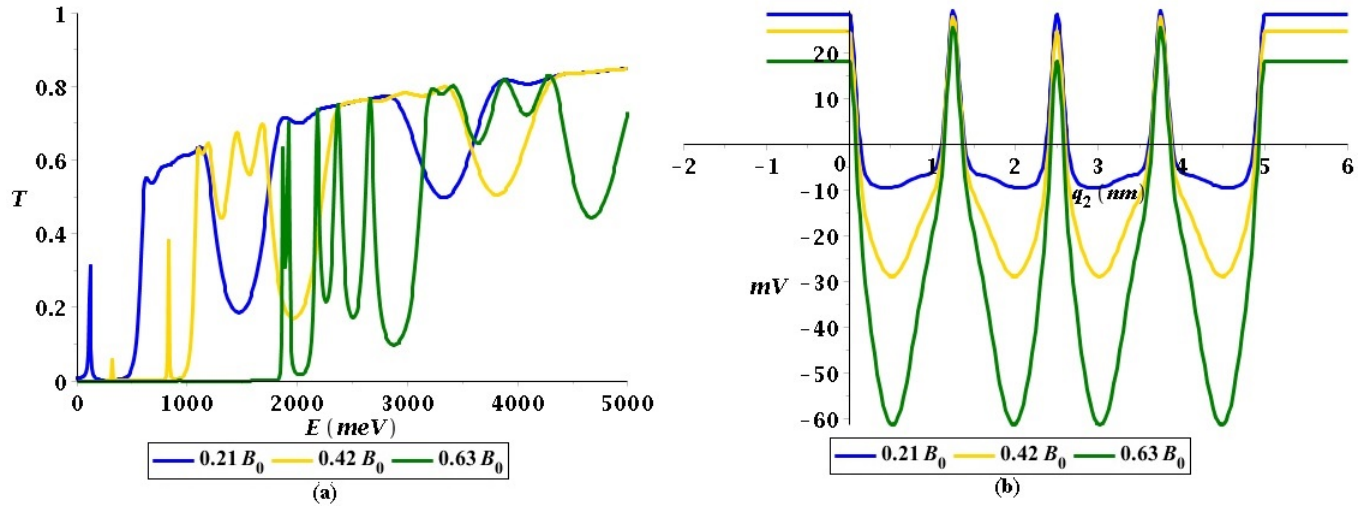


Figura 4.11: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 2$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

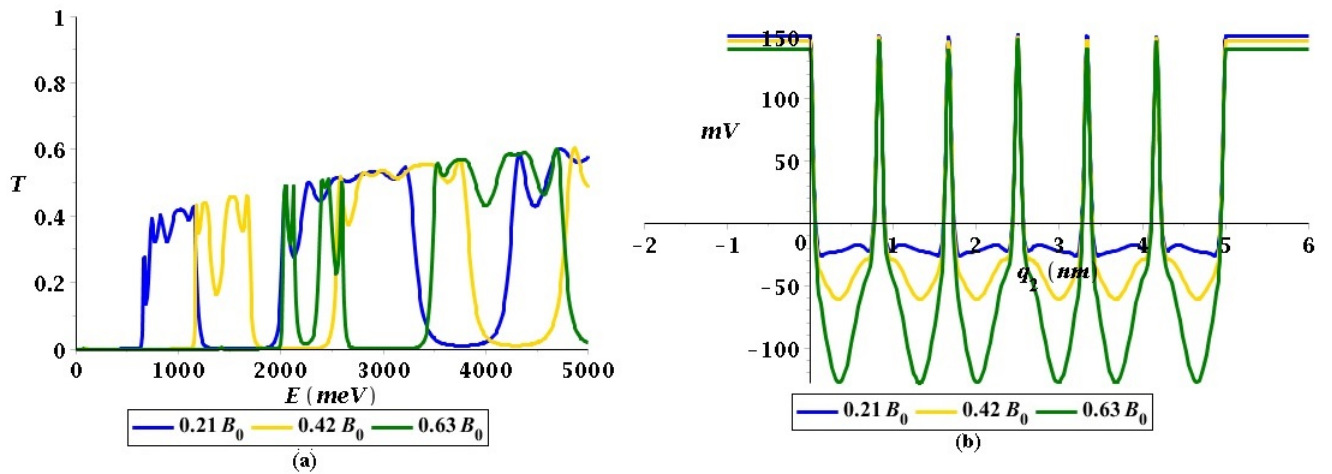


Figura 4.12: (a) Transmitância pela energia incidente (meV) para $n = 3$ e $\epsilon = -0.4$; (b) o potencial efetivo (mV) para diferentes campos magnéticos.

em que o elétron não é conduzido pela superfície. O tamanho dessas faixas é novamente influenciada pelo potencial efetivo, quanto mais profundo os seus vales e mais intensos os seus picos, mais elétrons são refletidos ou presos no potencial. Aqueles com energia próximas às energias de estados quase ligados tem sua probabilidade de transmitância diminuída.

Quando comparamos com [1] percebemos que as faixas de *gap* surgem mais facilmente para casos mais simples com a influência do campo magnético. Também podemos observar o controle das faixas de *gap* à medida que aumentamos o campo magnético. Assim como

proposto por [1] as deformações de nanotubos podem ser construídas com a finalidade de construir filtros eletrônicos, e com a influência do campo magnético controlar as faixas de *gap* e de transmissão.

Conclusão

Nesse trabalho nós investigamos as propriedades de transporte eletrônico em sistemas quânticos bidimensionais, mais especificamente em nanotubos, levando em consideração duas vertentes diferentes. Uma com a inclusão da massa efetiva dependente da posição, uma vez que, consideramos deformações nos nanotubos, que por consequência tem massa efetiva diferente em cada posição. E a outra com a imersão de um nanotubo a um campo magnético aplicado paralelamente ao seu eixo.

Na primeira nós seguimos o procedimento descrito por da Costa [10] e obtivemos a equação de Schrödinger para partículas quânticas confinadas a uma superfície em geral com a massa dependente da posição. Vimos que a introdução da massa dependente da posição não altera a forma do potencial geométrico, mesmo com a presença de dois termos extras no hamiltoniano devido a essa consideração.

Obtivemos também expressões para a transmitância e a reflectância para uma superfície de revolução, qual é obtida através da solução de um conjunto misto de equações algébricas e diferenciais.

Como primeira aplicação avaliamos os efeitos dessa consideração em nanotubos deformados. Podemos avaliar que para uma pequena deformação, assim como para o aumento de deformações, a massa dependente da posição torna-se relevante. De fato, a massa dependente da posição corrige os picos de ressonância na transmitância e o comprimento do *gap* de energia. O que deixa claro o importante papel da massa dependente da posição nas propriedades de transporte de sistemas quânticos bidimensionais.

Já no que diz respeito a inclusão do campo magnético, seguimos os passos de Ferrari e Cuoghi [3] para reproduzir a equação de Schrödinger para uma partícula quântica confinada

a uma superfície curva inseridos em um campo magnético.

Lá foi visto que existe um desacoplamento entre os campos e a curvatura da superfície. E que dada uma escolha apropriada do gauge encontramos a equação que descreve o movimento da partícula na superfície.

Com posse dessa equação calculamos a equação diferencial apenas com a presença do campo magnético aplicado na direção do eixo de uma superfície de revolução. Assim como feito para a massa variável, são calculadas as expressões para a transmitância e reflectância de maneira similar. Uma vez que para uma superfície cilíndrica a presença do campo nessa direção não afeta a transmitância, recorreremos mais uma vez a nanotubos deformados.

Os nossos resultados demonstraram um grande aumento no número de picos de ressonância na transmitância quando comparados na ausência do campo. É nítida a abertura de *gaps* de energia já nos casos com poucas deformidades, o que ocorre apenas com muitas deformidades sem o campo magnético. Além disso, a mudança na localização dos picos de ressonância, assim como a largura nos *gaps* de energia são alteradas com o aumento da intensidade do campo. Isso deixa claro que o campo magnético pode ser de grande importância no controle da localização de *gaps* de energia e dos picos de ressonância.

Assim, nesse trabalho mostramos as importantes contribuições que a massa dependente da posição, e o campo magnético desempenham nas propriedades de transporte de sistemas quânticos bidimensionais quando combinados com curvatura. Também fica claro que futuras aplicações de curvatura para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos baseados em nanotubos, podem ser pensados com as propriedades específicas desejadas com escolhas sutis da função $m(x)$. Além do controle de suas propriedades por meio do campo magnético.

Apêndice A

Código Maple para Massa variável

Planilha Massa variável

Podemos imaginar a função do nanotubo como

$$r1 + r2/2 \cdot (1 - \cos(2 \cdot n \cdot \text{Pi} \cdot x/L))$$

Definindo a função do tubo: Em termos de r1(raio inicial), r2(raio final) e L (Tamanho da junção), n (número de oscilações).

restart;

r1 := 5;

5

(1)

r2 := 5;

5

(2)

L := 5;

5

(3)

n := 1;

1

(4)

[> $\epsilon := 1$

$\epsilon := 1$

(5)

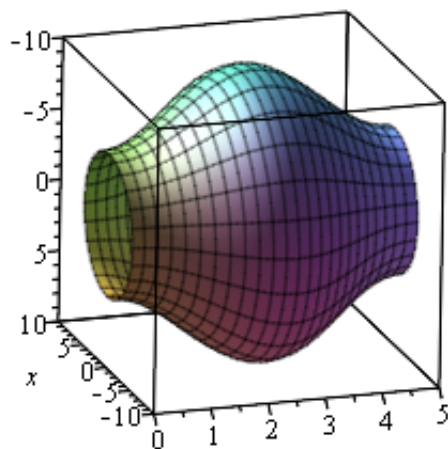
ro := proc(x, r1, r2, L, n) r1 + $\frac{(r2 \cdot \epsilon)}{2} \cdot \left(1 - \cos\left(\frac{2 \cdot n \cdot \text{Pi} \cdot x}{L}\right)\right)$ end proc;

proc(x, r1, r2, L, n) r1 + 1/2 * r2 * ϵ * (1 - cos(2 * n * Pi * x / L)) end proc

(6)

Vizualização do tubo.

*plot3d([ro(x, r1, r2, L, n), t, x], t = 0 .. 2 * Pi, x = 0 .. L, coords = cylindrical);*



Definindo a primeira derivada do tubo (Ro1)

$$\begin{aligned} Ro1 &:= \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(ro(x, r1, r2, L, n), x) \text{ end proc;} \\ & \quad \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(ro(x, r1, r2, L, n), x) \text{ end proc} \end{aligned} \quad (7)$$

Tornando-a função (ro1)

$$\begin{aligned} ro1 &:= \text{unapply}(Ro1(x, r1, r2, L, n), x); \\ x &\rightarrow \sin\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi \end{aligned} \quad (8)$$

Definindo a segunda derivada do tubo (Ro2)

$$\begin{aligned} Ro2 &:= \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(Ro1(x, r1, r2, L, n), x) \text{ end proc;} \\ & \quad \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(Ro1(x, r1, r2, L, n), x) \text{ end proc} \end{aligned} \quad (9)$$

Tornando-a função (ro2)

$$\begin{aligned} ro2 &:= \text{unapply}(Ro2(x, r1, r2, L, n), x); \\ x &\rightarrow \frac{2}{5} \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi^2 \end{aligned} \quad (10)$$

Definindo a massa efetiva variável(m) dependendo do seu diâmetro segundo o do artigo Karim. Em termos da:

Massa efetiva do eletrón em $\text{meV} \cdot \text{s}^2 / \text{nm}^2$:

$$\begin{aligned} me &:= 5.68 \cdot 10^{-27}; \\ & \quad 5.680000000 \cdot 10^{-27} \end{aligned} \quad (11)$$

Da constante de Planck em $\text{meV} \cdot \text{s}$:

$$\begin{aligned} h &:= 6.58 \cdot 10^{-13}; \\ & \quad 6.580000000 \cdot 10^{-13} \end{aligned} \quad (12)$$

Portanto:

$$\begin{aligned} m &:= \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \frac{8 \cdot (h)^2 \cdot me \cdot \left(2 \cdot \left(r1 + \frac{(r2 \cdot \epsilon)}{2} \cdot \left(1 - \cos\left(\frac{2 \cdot n \cdot \text{Pi} \cdot x}{L}\right) \right) \right) \right)^{-0.7835}}{9 \cdot (2.44 \cdot 10^{-3})^2 \cdot 0.142\text{E}-9 \cdot 10^{-9}} \text{ end proc;} \\ & \quad \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \end{aligned} \quad (13)$$

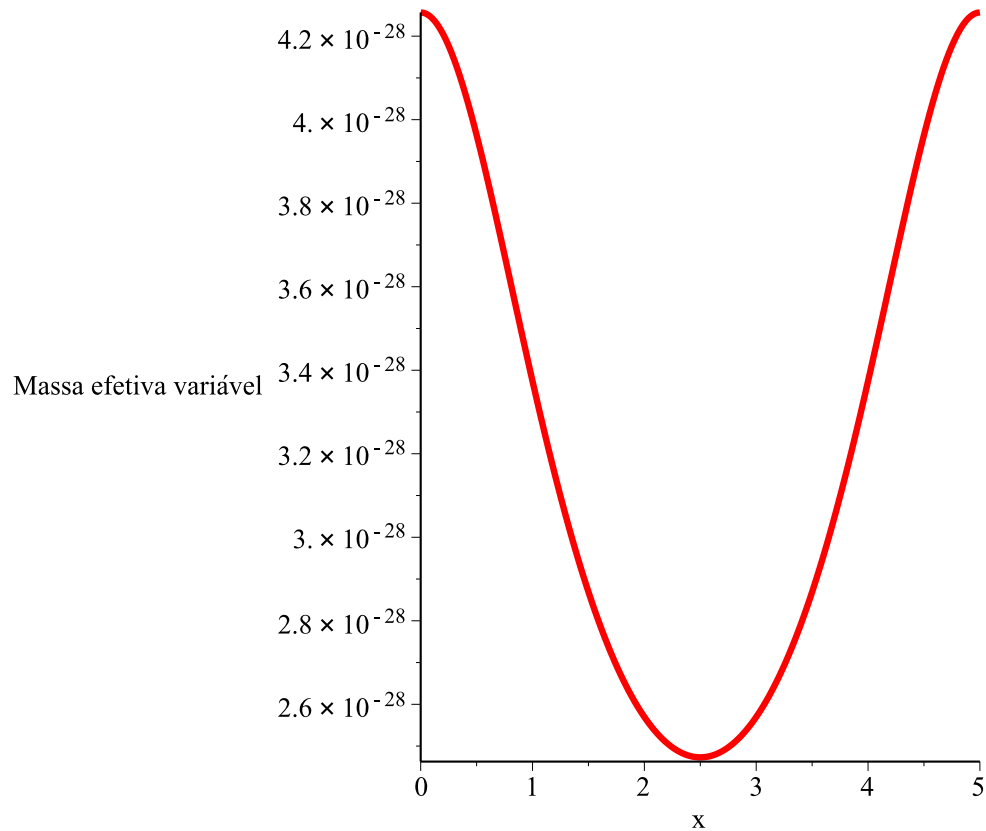
$$\begin{aligned} & \quad 8000000000000000000 / 9 * h^2 * me / ((2 * r1 + r2 * \epsilon * (1 - \cos(2 * n * \text{Pi} * x / L))) ^ 0.7835 \\ & \quad * 2.44^2 * 1.42 \cdot 10^{-10}) \end{aligned}$$

end proc

$$\begin{aligned} & \left[> m(2.5, r1, r2, L, n) \right. \\ & \quad \left. 2.472991376 \cdot 10^{-28} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

Plotando a massa efetiva ao longo do tubo.

$\text{plot}(m(x, r1, r2, L, n), x=0..L, \text{thickness}=3, \text{color}=\text{red}, \text{labels}=["x", "Massa efetiva variável"]);$



Definindo o potencial da Costa (ou potencial Geometrico);

$$V_{geo} := \text{proc}(x, r1, r2, L, n) - \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m(x, r1, r2, L, n)} \cdot \frac{(1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 + ro(x, r1, r2, L, n) \cdot ro2(x, r1, r2, L, n))^2}{ro(x, r1, r2, L, n)^2 \cdot (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2)^3} \text{end proc;}$$

proc(x, r1, r2, L, n)

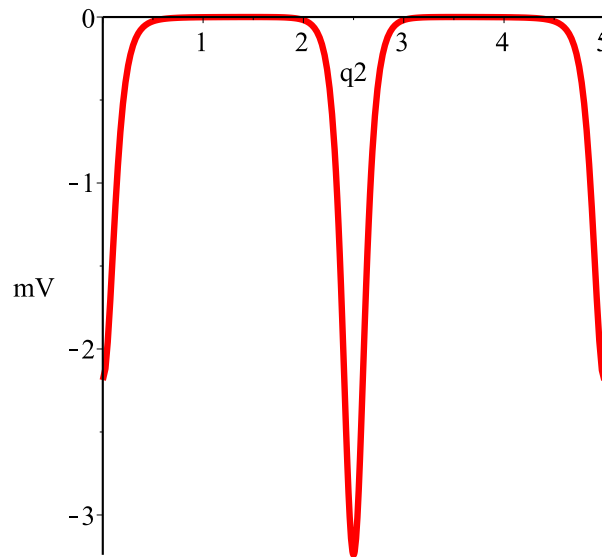
$$- 1/8 * h^2 * (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 + ro(x, r1, r2, L, n) * ro2(x, r1, r2, L, n))^2 / (m(x, r1, r2, L, n) * ro(x, r1, r2, L, n)^2 * (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2)^3)$$

end proc

Plotando esse potencial ao longo do tubo

$$\text{plot}\left(\frac{V_{geo}(x, r1, r2, L, n)}{1000}, x=0..L, \text{color} = \text{red}, \text{thickness} = 3, \text{labels} = ["q2", "mV"]\right);$$

(15)



Vamos construir o potencial efetivo. Para isso vamos definir várias equações.

$$\begin{aligned}
 F := & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) \frac{1}{ro(x, r1, r2, L, n)} \cdot ro1(x, r1, r2, L, n) \cdot (1 - ro(x, r1, r2, L, n) \cdot ro2(x, r1, r2, \\
 & L, n) \cdot (1 + (ro1(x, r1, r2, L, n))^2)^{-1}) \text{end proc}; \\
 & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) \\
 & ro1(x, r1, r2, L, n) * (1 - ro(x, r1, r2, L, n) * ro2(x, r1, r2, L, n) / (1 + ro1(x, r1, r2, L, n) \\
 & ^2)) / ro(x, r1, r2, L, n) \\
 & \text{end proc}
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 G := & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) 1 + (ro1(x, r1, r2, L, n))^2 \text{end proc}; \\
 & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) 1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 \text{end proc}
 \end{aligned} \tag{17}$$

Definindo a derivada do inverso da massa efetiva

$$\begin{aligned}
 M1 := & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{diff}\left(\frac{1}{m(x, r1, r2, L, n)}, x\right) \text{end proc}; \\
 & \text{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{diff}(1/m(x, r1, r2, L, n), x) \text{end proc}
 \end{aligned} \tag{18}$$

Tornando-a como uma função

$$\begin{aligned}
 m1 := & \text{unapply}(M1(x, r1, r2, L, n), x); \\
 & x \rightarrow \frac{6.060233993 \cdot 10^{26} \sin\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi}{\left(15 - 5 \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right)\right)^{0.2165}}
 \end{aligned} \tag{19}$$

Definindo a segunda derivada do inverso da massa efetiva

$$M2 := \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(M1(x, r1, r2, L, n), x) \mathbf{end proc};$$

$$\mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(M1(x, r1, r2, L, n), x) \mathbf{end proc} \quad (20)$$

Tonando-a função

$$m2 := \mathbf{unapply}(M2(x, r1, r2, L, n), x);$$

$$x \rightarrow - \frac{2.624081319 \cdot 10^{26} \sin\left(\frac{2}{5} \pi x\right)^2 \pi^2}{\left(15 - 5 \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right)\right)^{1.2165}} + \frac{2.424093597 \cdot 10^{26} \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi^2}{\left(15 - 5 \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right)\right)^{0.2165}} \quad (21)$$

Definindo V1

$$V1 := \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) F(x, r1, r2, L, n) + m(x, r1, r2, L, n) \cdot ml(x, r1, r2, L, n) \mathbf{end proc};$$

$$\mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) F(x, r1, r2, L, n) + m(x, r1, r2, L, n) * ml(x, r1, r2, L, n) \mathbf{end proc} \quad (22)$$

Definindo a primeira derivada de V1

$$vp := \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(V1(x, r1, r2, L, n), x) \mathbf{end proc};$$

$$\mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n) \text{ diff}(V1(x, r1, r2, L, n), x) \mathbf{end proc} \quad (23)$$

Tornando-a função

$V1p := \mathbf{unapply}(vp(x, r1, r2, L, n), x)$: Os dois pontos no final da expressão serve para que ela não seja mostrada, porém ela está na memória.

Definindo V2

$$V2 := \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) \frac{m(x, r1, r2, L, n)}{3} \cdot (m2(x, r1, r2, L, n) + F(x, r1, r2, L, n) \cdot ml(x, r1, r2, L, n)) + \frac{G(x, r1, r2, L, n) \cdot (Ek - V_{geo}(x, r1, r2, L, n)) \cdot 2 \cdot m(x, r1, r2, L, n)}{h^2} \mathbf{end proc};$$

$$\mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) \quad (24)$$

$$1/3 * m(x, r1, r2, L, n) * (m2(x, r1, r2, L, n) + F(x, r1, r2, L, n) * ml(x, r1, r2, L, n)) + 2 * G(x, r1, r2, L, n) * (Ek - V[geo](x, r1, r2, L, n)) * m(x, r1, r2, L, n) / h^2$$

end proc

$$\boxed{>} V2f := \mathbf{unapply}(V2(x, r1, r2, L, n, Ek), x, Ek) :$$

Defindo o potencial efetivo

$$VEFF := \mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) - \frac{1}{4} \cdot V1(x, r1, r2, L, n)^2 - \frac{1}{2} \cdot V1p(x, r1, r2, L, n) + V2(x, r1, r2, L, n, Ek) \mathbf{end proc};$$

$$\mathbf{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) \quad (25)$$

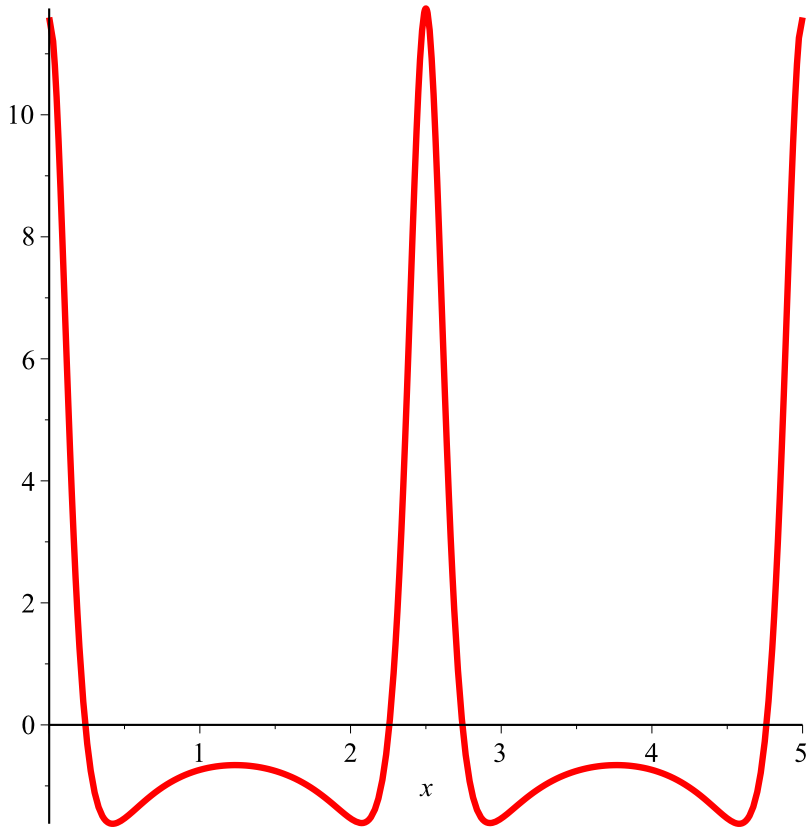
$$- 1/4 * V1(x, r1, r2, L, n)^2 - 1/2 * V1p(x, r1, r2, L, n) + V2(x, r1, r2, L, n, Ek)$$

end proc

$$\boxed{>} VEFFf := \mathbf{unapply}(VEFF(x, r1, r2, L, n, Ek), x, Ek) :$$

Plotando o potencial efetivo

$$\mathbf{plot}(VEFFf(x, r1, r2, L, n, 0), x = 0 .. L, \mathbf{color} = \mathbf{red}, \mathbf{thickness} = 3);$$



Construindo o Potencial que descreve as condições de contorno do problema

$Vx := \text{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) \text{ piecewise}(x \leq 0, VEFF(0, r1, r2, L, n, Ek), x < L, VEFF(x, r1, r2, L, n, Ek), VEFF(L, r1, r2, L, n, Ek)) \text{ end proc};$

proc($x, r1, r2, L, n, Ek$)

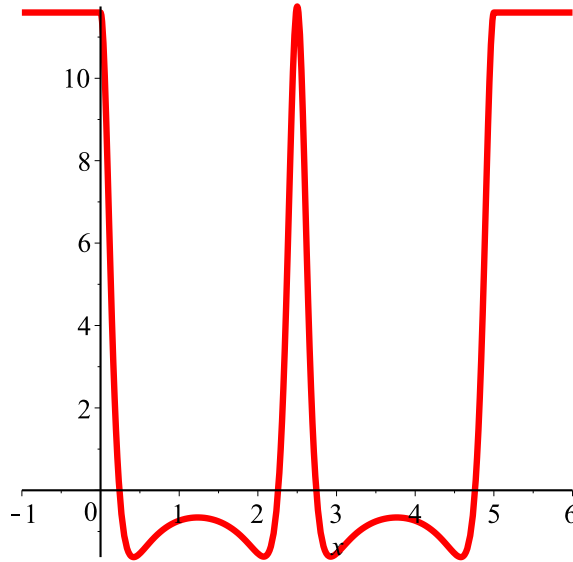
(26)

$\text{piecewise}(x \leq 0, VEFF(0, r1, r2, L, n, Ek), x < L, VEFF(x, r1, r2, L, n, Ek), VEFF(L, r1, r2, L, n, Ek))$

end proc

Plotando esse potencial

$\text{plot}(\text{evalf}(Vx(x, r1, r2, L, n, 0)), x = -1 .. L + 1, \text{thickness} = 3, \text{color} = \text{red});$



Definindo a equação de Schrodinger e dividindo elas em duas EDO's, uma para a solução real e a outra a imaginária. Primeiro a equação de Schrodinger

$odex := diff(\psi(x), x, x) + V_S(x) * \psi(x);$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_S(x) \psi(x) \quad (27)$$

Agora a de parte real

$ode1 := eval(odex, \psi(x) = u(x));$

$$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + V_S(x) u(x) \quad (28)$$

e a de parte imaginária

$ode2 := eval(odex, \psi(x) = v(x));$

$$\frac{d^2}{dx^2} v(x) + V_S(x) v(x) \quad (29)$$

Definindo agora as condições de contorno

$$c1 := u(0) + 2/2 * (D(v))(0) / \sqrt{4 * 0 + 2 * m(0, r1, r2, L, n) / (h * h) * Ek + 1 / (4 * r1^2)} - (1/2) * F(0, r1, r2, L, n) * v(0) / \sqrt{4 * 0 + 2 * m(0, r1, r2, L, n) / (h * h) * Ek + 1 / (4 * r1^2)} - F(0, r1, r2, L, n) * v(0) / (2 * (1/r1^2)) = 2 * \text{Re}(a0) :$$

$$c2 := v(0) - 2/2 * (D(u))(0) / \sqrt{4 * 0 + 2 * m(0, r1, r2, L, n) / (h * h) * Ek + 1 / (4 * r1^2)} - F(0, r1, r2, L, n) * u(0) / (2 * (1/r1^2)) = 2 * \text{Im}(a0) :$$

$$c3 := u(L) - 2/2 * (D(v))(L) / \sqrt{4 * 0 + 2 * m(L, r1, r2, L, n) / (h * h) * Ek + 1 / (4 * r2^2)} - (1/2)$$

* $F(L, r1, r2, L, n) * r2^2 * u(L) = 2 * \text{Re}(aL) :$
 $c4 := v(L) + 2/2 * (D(u))(L) / \text{sqrt}(4 * 0 + 2 * m(L, r1, r2, L, n) / (h * h) * Ek + 1 / (4 * r2^2)) - (1$
 $/ 2) * F(L, r1, r2, L, n) * r2^2 * v(L) = 2 * \text{Im}(aL) :$

Tornando as condições de contorno funções

$bcs := \text{unapply}(\{c1, c2, c3, c4\}, a0, aL, Ek) :$

Resolvendo as EDO's

$res := \text{proc}(W, L, r1, r2, n, a0, aL, Ek)$
local $sol, u0, u1, v0, v1, k0, kL, b0, bL, Z;$
 $sol := \text{dsolve}(\text{eval}(\{ode1, ode2\}, \{Vs = W\})) \text{ union } bcs(a0, aL, Ek), \text{numeric}, \text{output} = \text{listprocedure},$
 $\text{maxmesh} = 20000);$
 $u0, u1, v0, v1 := \text{op}(\text{subs}(sol, [u(x), \text{diff}(u(x), x), v(x), \text{diff}(v(x), x)]));$
 $k0 := \text{sqrt}(2 * (\text{subs}(x=0, m(x, r1, r2, L, n))) / (h * h) * (Ek - (\text{subs}(x=0, V_{geo}(x, r1, r2, L, n)))));$
 $kL := \text{sqrt}(2 * (\text{subs}(x=L, m(x, r1, r2, L, n))) / (h * h) * (Ek - (\text{subs}(x=L, V_{geo}(x, r1, r2, L, n)))));$
 $b0 := 1/2 * (u0(0) + I * v0(0) + I * (u1(0) + I * v1(0)) / k0);$
 $bL := 1/2 * (u0(L) + I * v0(L) - I * (u1(L) + I * v1(L)) / kL);$
 $\text{piecewise}(x < 0, a0 * \exp(I * k0 * x) + b0 * \exp(-I * k0 * x), x \leq L, u0(x) + I * v0(x), aL * \exp(I * kL$
 $* (L - x)) + bL * \exp(-I * kL * (L - x));$
 $Z := [b0, bL];$

end proc;

proc($W, L, r1, r2, n, a0, aL, Ek$) (30)

local $sol, u0, u1, v0, v1, k0, kL, b0, bL, Z;$

$sol := \text{dsolve}(\text{eval}(\{ode1, ode2\}, \{Vs = W\})) \text{ union } bcs(a0, aL, Ek), \text{numeric}, \text{output}$
 $= \text{listprocedure}, \text{maxmesh} = 20000);$

$u0, u1, v0, v1 := \text{op}(\text{subs}(sol, [u(x), \text{diff}(u(x), x), v(x), \text{diff}(v(x), x)]));$

$k0 := \text{sqrt}(2 * \text{subs}(x=0, m(x, r1, r2, L, n)) * (Ek - \text{subs}(x=0, V[\text{geo}](x, r1, r2, L, n))) / (h$
 $* h));$

$kL := \text{sqrt}(2 * \text{subs}(x=L, m(x, r1, r2, L, n)) * (Ek - \text{subs}(x=L, V[\text{geo}](x, r1, r2, L, n)))$
 $/ (h * h));$

$b0 := 1/2 * u0(0) + 1/2 * I * v0(0) + 1/2 * I * (u1(0) + I * v1(0)) / k0;$

$bL := 1/2 * u0(L) + 1/2 * I * v0(L) - 1/2 * I * (u1(L) + I * v1(L)) / kL;$

$\text{piecewise}(x < 0, a0 * \exp(I * k0 * x) + b0 * \exp(-I * k0 * x), x \leq L, u0(x) + I * v0(x), aL$
 $* \exp(I * kL * (L - x)) + bL * \exp(-I * kL * (L - x));$

$Z := [b0, bL]$

end proc

Tornando o potencial concreto

$w := \text{proc}(x, r1, r2, L, n, Ek) \text{ unapply}(\text{evalf}(Vx(x, r1, r2, L, n, Ek)), x); \text{end proc};$

proc($x, r1, r2, L, n, Ek$) $\text{unapply}(\text{evalf}(Vx(x, r1, r2, L, n, Ek)), x)$ **end proc** (31)

$CV0 := \text{proc}(Ek, A0) \text{ res}(w(x, r1, r2, L, n, Ek), L, r1, r2, n, A0, 0, Ek) \text{end proc};$

proc($Ek, A0$) $\text{res}(w(x, r1, r2, L, n, Ek), L, r1, r2, n, A0, 0, Ek)$ **end proc** (32)

$\text{evalf}(CV0(50, 1));$

[0.109650843411460 + 0.482614949435848 I, 0.0558008989848321 + 0.0360618774243048 I] (33)

$B0 := \text{proc}(Ek, A0) \text{ op}(1, CV0(Ek, A0)); \text{end proc};$

proc($Ek, A0$) $\text{op}(1, CV0(Ek, A0))$ **end proc** (34)


```
BL :=proc(Ek, A0) op(2, CV0(Ek, A0)); end proc;
      proc(Ek, A0) op(2, CV0(Ek, A0)) end proc (35)
```

```
T :=proc(Ek, A0) evalf( ( m(0, r1, r2, L, n) / m(L, r1, r2, L, n) * ratio(Ek) * abs(BL(Ek, A0)) ** 2 ) ) end proc;
proc(Ek, A0) (36)
```

```
  evalf(m(0, r1, r2, L, n) * ratio(Ek) * abs(BL(Ek, A0)) ^2 / m(L, r1, r2, L, n))
end proc
```

```
ratio :=proc(Ek) sqrt( ( Ek - subs(x=L, V_geo(x, r1, r2, L, n)) ) / ( Ek - subs(x=0, V_geo(x, r1, r2, L, n)) ) ); end proc;
```

```
proc(Ek) (37)
```

```
  sqrt( ( Ek - subs(x=L, V[geo](x, r1, r2, L, n)) ) / ( Ek - subs(x=0, V[geo](x, r1, r2, L, n)) ) )
```

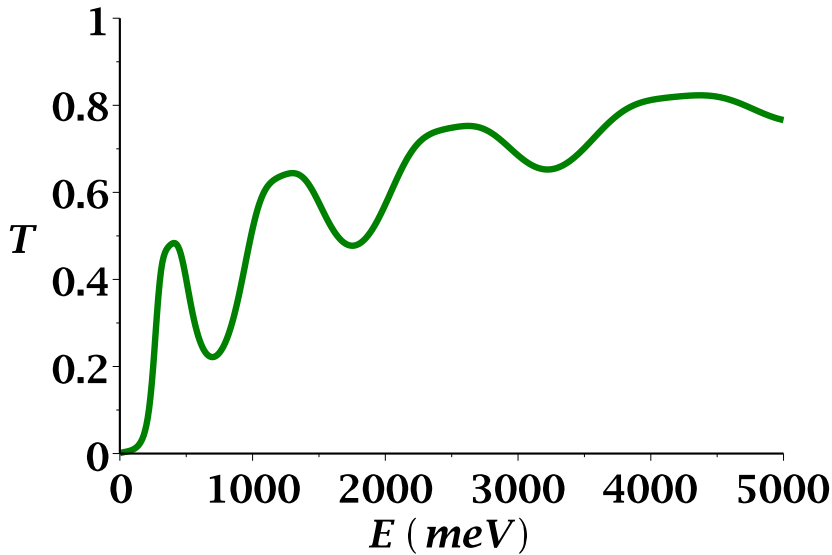
```
end proc
```

```
[ > evalf(ratio(0));
                                     0.9999999999 (38)
```

```
[ > evalf( ( m(0, r1, r2, L, n) / m(L, r1, r2, L, n) ) );
                                     1.0000000000 (39)
```

```
with(plots) :
```

```
pointplot([seq([e, T(e, 1)], e=0..5000, 10)], connect=true, thickness=3, labels=[E, T], labelfont=[Times, Bold, 14], thickness=3, font=[Times, bold, 14], labelfont=[Times, bold, 14], view=[0..5000, 0..1]);
```



Apêndice B

Código Maple para o campo magnético
paralelo

Planilha Junções de Nanotubos, com os raios iniciais e finais iguais, Inseridos em campos-Magnéticos Paralelos a superfície

Podemos imaginar a função do nanotubo como:

$$r1 + (r2\epsilon/2) \cdot (1 - \cos(2 \cdot n \cdot \text{Pi} \cdot x/L))$$

Definindo a função do tubo: Em termos de r1(raio principal), r2(raio maximo de modificação) e L (Tamanho da junção), n(número de oscilações) .

restart;

$$r1 := 5; \quad 5 \quad (1)$$

$$r2 := 5; \quad 5 \quad (2)$$

Comprimento da deformação

$$L := 5; \quad 5 \quad (3)$$

Número de ondulações (Ou compressões)

$$n := 1 \quad 1 \quad (4)$$

Campo magnético Paralelo

$$B0 := 0.63 \cdot 8.9 \cdot 10^6; \quad 5.607000000 \cdot 10^6 \quad (5)$$

Constante do momento angular

$$l := 0; \quad 0$$

Parâmetro da intensidade da deformação

$$\epsilon := -0.4 \quad -0.4$$

Potencial Eletrico(em 10^2 meV/C)

$$V := 0; \quad 0 \quad (8)$$

Carga do Eletron

$$Q := 1.6 \cdot 10^{-19}; \quad 1.600000000 \cdot 10^{-19} \quad (9)$$

$$ro := \text{proc}(x, r1, r2, L, n) \quad r1 + \frac{(r2 \cdot \epsilon)}{2} \cdot \left(1 - \cos\left(2 \cdot n \cdot \text{Pi} \cdot \frac{x}{L} \right) \right)$$

end proc;

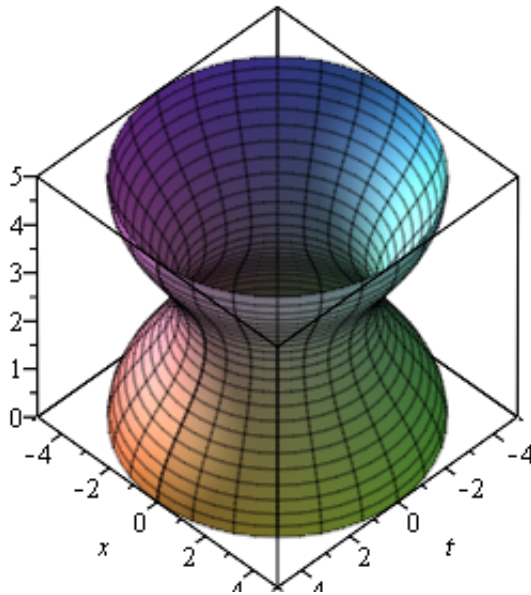
$$\text{proc}(x, r1, r2, L, n) \quad r1 + 1/2 * r2 * \epsilon * (1 - \cos(2 * n * \text{Pi} * x / L)) \quad \text{end proc} \quad (10)$$

$$\left[\right] > ro(4, 5, 5, 5, 1)$$

$$4.000000000 + 1.000000000 \cos\left(\frac{2}{5} \pi\right) \quad (11)$$

Vizualização do tubo.

`plot3d([ro(x, r1, r2, L, n), t, x], t=0..2*Pi, x=0..L, coords=cylindrical);`



Definindo a primeira derivada do tubo(Ro1)

`Ro1 := proc(x, r1, r2, L, n) diff(ro(x, r1, r2, L, n), x) end proc;`
`proc(x, r1, r2, L, n) diff(ro(x, r1, r2, L, n), x) end proc` (12)

Tornando-a função(r01)

`ro1 := unapply(Ro1(x, r1, r2, L, n), x);`

$$x \rightarrow -0.4000000000 \sin\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi \quad (13)$$

`> ro1(1, 1, 1, 1, 1)`

$$-0.4000000000 \sin\left(\frac{2}{5} \pi\right) \pi \quad (14)$$

Definindo a segunda derivada do tubo(Ro2)

`Ro2 := proc(x, r1, r2, L, n) diff(Ro1(x, r1, r2, L, n), x) end proc;`
`proc(x, r1, r2, L, n) diff(Ro1(x, r1, r2, L, n), x) end proc` (15)

Tornando-a função (r02)

`ro2 := unapply(Ro2(x, r1, r2, L, n), x);`

$$x \rightarrow -0.1600000000 \cos\left(\frac{2}{5} \pi x\right) \pi^2 \quad (16)$$

`> evalf(ro2(2))`

$$1.277548430 \quad (17)$$

Definindo a massa efetiva para o eletrôn livre (Aqui estamos considerando a massa constante ao longo

do tubo)

$$m := 0.173 \cdot 5.68 \cdot 10^{-27}$$

$$9.826400000 \cdot 10^{-28} \quad (18)$$

Da constante de Planck em meV.s:

$$h := 6.58 \cdot 10^{-13};$$

$$6.580000000 \cdot 10^{-13} \quad (19)$$

Definindo o potencial da Costa (ou potencial Geometrico);

$$V_{geo} := \text{proc}(x, r1, r2, L, n) - \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m} \cdot \frac{(1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 + ro(x, r1, r2, L, n) \cdot ro2(x, r1, r2, L, n))^2}{ro(x, r1, r2, L, n)^2 \cdot (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2)^3} \text{end proc};$$

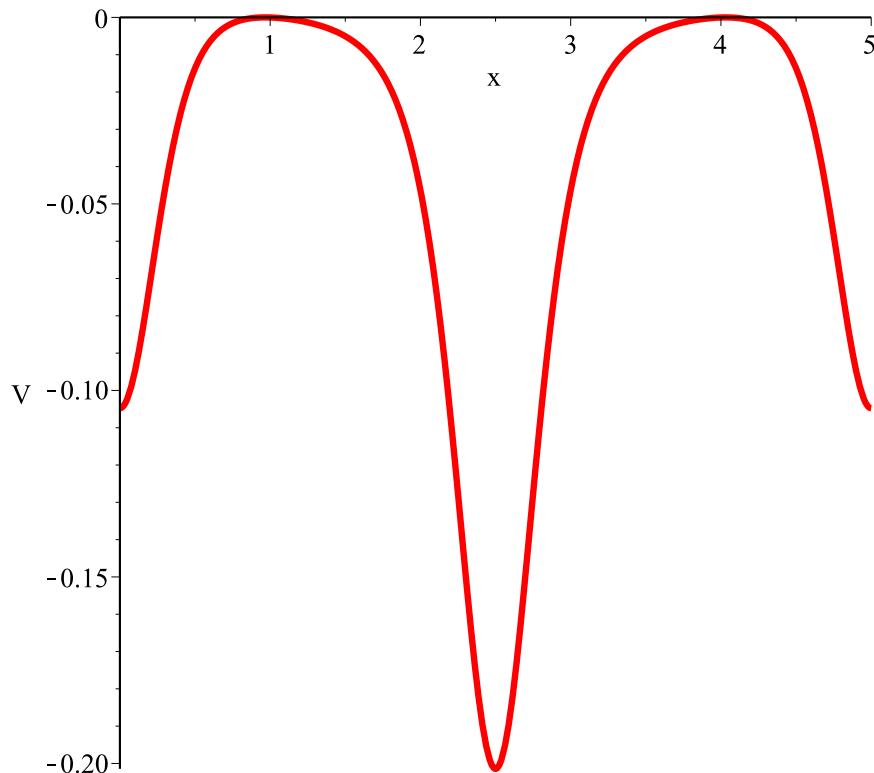
$$\text{proc}(x, r1, r2, L, n) \quad (20)$$

$$-1/8 * h^2 * (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 + ro(x, r1, r2, L, n) * ro2(x, r1, r2, L, n))^2 / (m * ro(x, r1, r2, L, n)^2 * (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2)^3)$$

end proc

Plotando esse potencial ao longo do tubo

$$\text{plot}\left(\frac{V_{geo}(x, r1, r2, L, n)}{1000}, x=0..L, \text{color}=\text{red}, \text{thickness}=3, \text{labels}=["x", "V"]\right);$$



Criando as Funções F e G

```
F :=proc(x, r1, r2, L, n)  $\frac{ro1(x, r1, r2, L, n)}{ro(x, r1, r2, L, n)} \cdot \left( 1 - \frac{ro(x, r1, r2, L, n) \cdot ro2(x, r1, r2, L, n)}{(1 + (ro1(x, r1, r2, L, n))^2)} \right)$  end proc;
```

```
proc(x, r1, r2, L, n)
```

```
    ro1(x, r1, r2, L, n) * (1 - ro(x, r1, r2, L, n) * ro2(x, r1, r2, L, n) / (1 + ro1(x, r1, r2, L, n)  
    ^2)) / ro(x, r1, r2, L, n)
```

```
end proc
```

```
evalf(F(4, 5, 5, 5, 1))
```

0.5175204992 (22)

```
G :=proc(x, r1, r2, L, n) 1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 end proc;
```

```
    proc(x, r1, r2, L, n) 1 + ro1(x, r1, r2, L, n)^2 end proc (23)
```

```
evalf(G(2, 1, 1, 2, 3))
```

1.545578313 (24)

Vamos definir os termos V1, a derivada de V1 e V2

```
V1 :=proc(x, r1, r2, L, n) F(x, r1, r2, L, n) end proc;
```

```
    proc(x, r1, r2, L, n) F(x, r1, r2, L, n) end proc
```

```
evalf(V1(1, 1, 1, 2, 3))
```

-2.232052343 (26)

Derivada de V1

```
v1p :=proc(x, r1, r2, L, n) diff(V1(x, r1, r2, L, n), x) end proc;
```

```
    proc(x, r1, r2, L, n) diff(V1(x, r1, r2, L, n), x) end proc
```

```
V1p := unapply(v1p(x, r1, r2, L, n), x) :
```

```
evalf(V1p(1))
```

0.7559670874

Definindo V2

```
V2 :=proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)  $G(x, r1, r2, L, n) \cdot \left( \frac{2 \cdot m}{h^2} (Ek - V_{geo}(x, r1, r2, L, n) - Q \cdot V) \right.$   
     $\left. + \frac{l^2}{ro(x, r1, r2, L, n)^2} - \frac{Q \cdot B0 \cdot l}{h} - \frac{Q^2 \cdot ro(x, r1, r2, L, n)^2 \cdot B0^2}{4 \cdot h^2} \right)$  end proc;
```

```
proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)
```

```
    G(x, r1, r2, L, n) * (2 * m * (Ek - Vgeo(x, r1, r2, L, n) - Q * V) / h^2 + l^2 / ro(x, r1, r2, L,  
    n)^2 - Q * B0 * l / h - 1 / 4 * Q^2 * ro(x, r1, r2, L, n)^2 * B0^2 / h^2)
```

```
end proc
```

```
evalf(V2(1, r1, r2, L, n, V, B0, 2, l))
```

-20.93116882

Construindo o potencial Efetivo

```

VEFF := proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) - 1/4 * V1(x, r1, r2, L, n)^2 - 1/2 * V1p(x, r1, r2, L, n) + V2(x,
r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) end proc ;
proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) (31)
- 1/4 * V1(x, r1, r2, L, n)^2 - 1/2 * V1p(x, r1, r2, L, n) + V2(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)
end proc

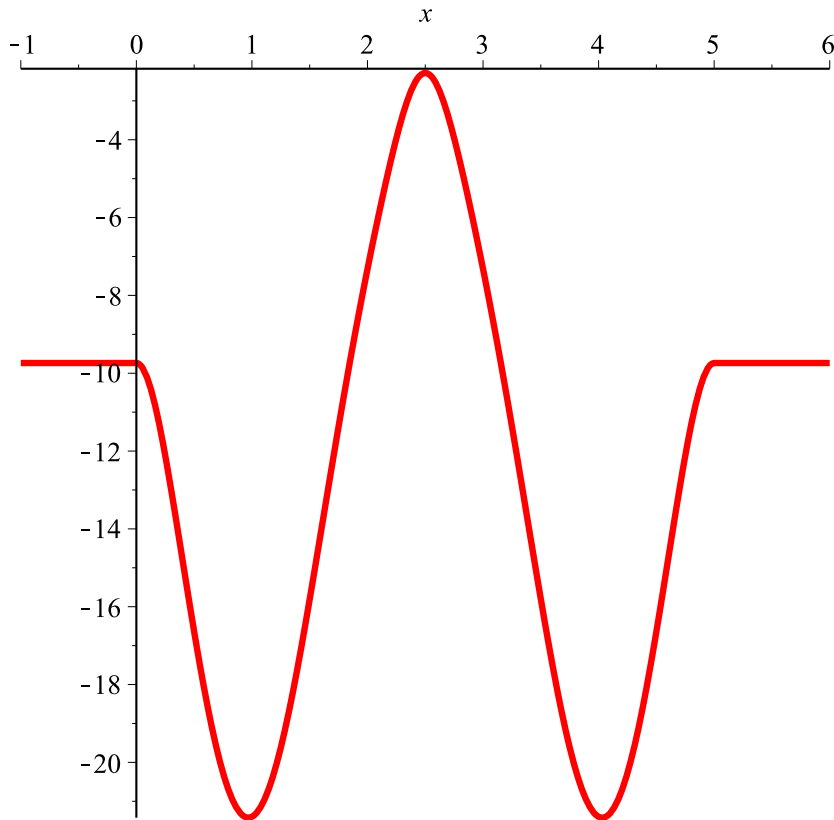
```

Construindo o Potencial que descreve as condições de contorno do problema

```

Vx := proc (x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) piecewise(x <= 0, VEFF(0, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l), x < L,
VEFF(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l), VEFF(L, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)) end proc;
proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) (32)
piecewise(x <= 0, VEFF(0, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l), x < L, VEFF(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek,
l), VEFF(L, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l))
end proc
plot(evalf(Vx(x, r1, r2, L, n, V, B0, 0, l)), x=-1..L+1, thickness=3, color=red);

```



Definindo a equação de Schrodinger e dividindo elas em duas EDO's, uma para a solução real e a outra a imaginária. Primeiro a equação de Schrodinger

$$\begin{aligned} \text{odex} &:= \text{diff}(\text{psi}(x), x, x) + V_s(x) * \text{psi}(x); \\ &\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_s(x) \psi(x) \end{aligned} \quad (33)$$

Agora a de parte real

$$\begin{aligned} \text{ode1} &:= \text{eval}(\text{odex}, \text{psi}(x) = u(x)); \\ &\frac{d^2}{dx^2} u(x) + V_s(x) u(x) \end{aligned} \quad (34)$$

e a de parte imaginária

$$\begin{aligned} \text{ode2} &:= \text{eval}(\text{odex}, \text{psi}(x) = v(x)); \\ &\frac{d^2}{dx^2} v(x) + V_s(x) v(x) \end{aligned} \quad (35)$$

Definindo agora as condições de contorno

$$\begin{aligned} c1 &:= u(0) + 2/2 \cdot (D(v))(0) / \text{sqrt}(4 \cdot 0 + 2 \cdot m / (h \cdot h) \cdot Ek + 1 / (4 \cdot r1^2)) - (1/2) \cdot F(0, r1, r2, L, n) \\ &\quad \cdot v(0) / \text{sqrt}(4 \cdot 0 + 2 \cdot m / (h \cdot h) \cdot Ek + 1 / (4 \cdot r1^2)) - F(0, r1, r2, L, n) \cdot v(0) / (2 \cdot (1/r1^2)) = 2 \\ &\quad \cdot \text{Re}(a0); \\ &u(0) + \frac{D(v)(0)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Re(a0) \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} c2 &:= v(0) - 2/2 \cdot (D(u))(0) / \text{sqrt}(4 \cdot 0 + 2 \cdot m / (h \cdot h) \cdot Ek + 1 / (4 \cdot r1^2)) - F(0, r1, r2, L, n) \cdot u(0) \\ &\quad / (2 \cdot (1/r1^2)) = 2 \cdot \text{Im}(a0); \\ &v(0) - \frac{D(u)(0)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Im(a0) \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} c3 &:= u(L) - 2/2 \cdot (D(v))(L) / \text{sqrt}(4 \cdot 0 + 2 \cdot m / (h \cdot h) \cdot Ek + 1 / (4 \cdot r2^2)) - (1/2) \cdot F(L, r1, r2, L, n) \\ &\quad \cdot r2^2 \cdot u(L) = 2 \cdot \text{Re}(aL); \\ &u(5) - \frac{D(v)(5)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Re(aL) \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} c4 &:= v(L) + 2/2 \cdot (D(u))(L) / \text{sqrt}(4 \cdot 0 + 2 \cdot m / (h \cdot h) \cdot Ek + 1 / (4 \cdot r2^2)) - (1/2) \cdot F(L, r1, r2, L, n) \\ &\quad \cdot r2^2 \cdot v(L) = 2 \cdot \text{Im}(aL); \\ &v(5) + \frac{D(u)(5)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Im(aL) \end{aligned} \quad (39)$$

Tornando as condições de contorno funções

$$\begin{aligned} \text{bcs} &:= \text{unapply}(\{c1, c2, c3, c4\}, a0, aL, Ek); \\ &(a0, aL, Ek) \rightarrow \begin{cases} u(0) + \frac{D(v)(0)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Re(a0), \\ u(5) \end{cases} \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{D(v)(5)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Re(aL), v(0) - \frac{D(u)(0)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} \\
& = 2 \Im(a0), v(5) + \frac{D(u)(5)}{\sqrt{0.004539130274 Ek + \frac{1}{100}}} = 2 \Im(aL) \Bigg\}
\end{aligned}$$

Resolvendo as EDO's

```

res := proc(W, L, r1, r2, n, a0, aL, Ek)
  local sol, u0, u1, v0, v1, k0, kL, b0, bL, Z;
  sol := dsolve(eval({ode1, ode2}, {Vs = W})) union bcs(a0, aL, Ek), numeric, output = listprocedure,
    maxmesh = 20000);
  u0, u1, v0, v1 := op(subs(sol, [u(x), diff(u(x), x), v(x), diff(v(x), x)]));
  k0 := sqrt(2 * m / (h * h) * (Ek - (subs(x = 0, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q * V)));
  kL := sqrt(2 * m / (h * h) * (Ek - (subs(x = L, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q * V)));
  b0 := 1/2 * (u0(0) + I * v0(0) + I * (u1(0) + I * v1(0)) / k0);
  bL := 1/2 * (u0(L) + I * v0(L) - I * (u1(L) + I * v1(L)) / kL);
  piecewise(x < 0, a0 * exp(I * k0 * x) + b0 * exp(-I * k0 * x), x <= L, u0(x) + I * v0(x), aL * exp(I * kL * (L - x))
    + bL * exp(-I * kL * (L - x)));
  Z := [b0, bL];

```

end proc;

proc(W, L, r1, r2, n, a0, aL, Ek) (41)

```

  local sol, u0, u1, v0, v1, k0, kL, b0, bL, Z;
  sol := dsolve((eval({ode1, ode2}, {Vs = W})) union bcs(a0, aL, Ek), numeric, output
    = listprocedure, maxmesh = 20000);
  u0, u1, v0, v1 := op(subs(sol, [u(x), diff(u(x), x), v(x), diff(v(x), x)]));
  k0 := sqrt(2 * m * (Ek - subs(x = 0, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q * V) / (h * h));
  kL := sqrt(2 * m * (Ek - subs(x = L, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q * V) / (h * h));
  b0 := 1/2 * u0(0) + 1/2 * I * v0(0) + 1/2 * I * (u1(0) + I * v1(0)) / k0;
  bL := 1/2 * u0(L) + 1/2 * I * v0(L) - 1/2 * I * (u1(L) + I * v1(L)) / kL;
  piecewise(x < 0, a0 * exp(I * k0 * x) + b0 * exp(-I * k0 * x), x <= L, u0(x) + I * v0(x), aL
    * exp(I * kL * (L - x)) + bL * exp(-I * kL * (L - x)));
  Z := [b0, bL]

```

end proc

w := **proc**(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) unapply(evalf(Vx(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)), x); **end proc;**

proc(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l) unapply(evalf(Vx(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l)), x) **end proc**

CV0 := **proc**(Ek, A0) res(w(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l), L, r1, r2, n, A0, 0, Ek) **end proc;**

proc(Ek, A0) res(w(x, r1, r2, L, n, V, B0, Ek, l), L, r1, r2, n, A0, 0, Ek) **end proc**

evalf(CV0(11, 1))

[-0.330420466126365 - 0.0985857880649677 I, 5.65566045485143 10⁻¹⁰
 - 3.79521797476673 10⁻⁹ I]

BL := **proc**(Ek, A0) op(2, CV0(Ek, A0)); **end proc;**

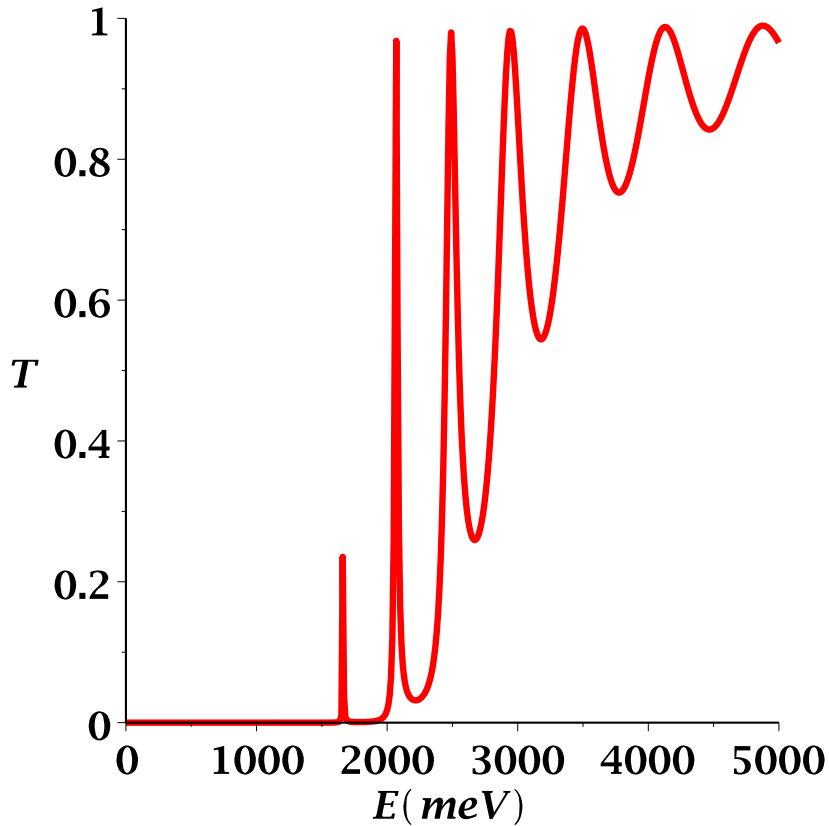
proc(Ek, A0) op(2, CV0(Ek, A0)) **end proc** (45)

Transmitância

```
T := proc(Ek, A0) evalf( ratio(Ek) * abs(BL(Ek, A0)) ** 2) end proc;  
      proc(Ek, A0) evalf( ratio(Ek) * abs(BL(Ek, A0))^2) end proc (46)
```

```
ratio := proc(Ek) sqrt( (Ek - subs(x=L, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q·V) / (Ek - subs(x=0, Vgeo(x, r1,  
      r2, L, n)) - Q·V) ); end proc;  
proc(Ek) (47)  
      sqrt( (Ek - subs(x=L, Vgeo(x, r1, r2, L, n)) - Q·V) / (Ek - subs(x=0, Vgeo(x, r1, r2, L,  
      n)) - Q·V) )  
end proc
```

```
with(plots) :  
pointplot( [seq( [e, T(e, 1)], e=0 ..5000, 10) ], connect=true, thickness=3, labels=[E, T], labelfont  
      = [Times, Bold, 14], thickness=3, color=RED, font=[Times, bold, 14], labelfont=[Times, bold,  
      14], view=[0 ..5000, 0 ..1]);
```



Referências Bibliográficas

- [1] Fernando Santos, Sébastien Fumeron, Bertrand Berche, and Fernando Moraes. Geometric effects in the electronic transport of deformed nanotubes. *Nanotechnology*, 27(13):135302, 2016.
- [2] Alex Marchi, Susanna Reggiani, Massimo Rudan, and Andrea Bertoni. Coherent electron transport in bent cylindrical surfaces. *Phys. Rev. B*, 72:035403, Jul 2005.
- [3] Giulio Ferrari and Giampaolo Cuoghi. Schrödinger equation for a particle on a curved surface in an electric and magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 100:230403, Jun 2008.
- [4] K. El Shabrawy, K. Maharatna, D. Bagnall, and B. M. Al-Hashimi. Modeling swcnt bandgap and effective mass variation using a monte carlo approach. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 9(2):184–193, March 2010.
- [5] Sumio Iijima. S. iijima, nature (london) 354, 56 (1991). *Nature (London)*, 354:56, 1991.
- [6] Stephen W Montgomery and Ven R Holalkere. Carbon nanotube thermal interface structures, November 15 2005. US Patent 6,965,513.
- [7] AM Fennimore, TD Yuzvinsky, Wei-Qiang Han, MS Fuhrer, J Cumings, and A Zettl. Rotational actuators based on carbon nanotubes. *Nature*, 424(6947):408, 2003.
- [8] M P Anantram and F Léonard. Physics of carbon nanotube electronic devices. *Reports on Progress in Physics*, 69(3):507, 2006.
- [9] Jonas R. F. Lima, M. Vieira, C. Furtado, F. Moraes, and Cleverson Filgueiras. Yet another position-dependent mass quantum model. *Journal of Mathematical Physics*, 53(7):072101, 2012.

-
- [10] R. C. T. da Costa. Quantum mechanics of a constrained particle. *Phys. Rev. A*, 23:1982–1987, Apr 1981.
- [11] H. Aoki and H. Suezawa. Landau quantization of electrons on a sphere. *Phys. Rev. A*, 46:R1163–R1166, Aug 1992.
- [12] Ju H. Kim, I. D. Vagner, and B. Sundaram. Electrons confined on the surface of a sphere in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 46:9501–9504, Oct 1992.
- [13] A Bachtold. A. bachtold et al., nature (london) 397, 673 (1999). *Nature (London)*, 397:673, 1999.
- [14] E Perfetto, J González, F Guinea, S Bellucci, and P Onorato. Quantum hall effect in carbon nanotubes and curved graphene strips. *Physical Review B*, 76(12):125430, 2007.
- [15] Jing Kong, Nathan R Franklin, Chongwu Zhou, Michael G Chapline, Shu Peng, Kyeongjae Cho, and Hongjie Dai. Nanotube molecular wires as chemical sensors. *science*, 287(5453):622–625, 2000.
- [16] DO CARMO Manfredo. Geometria diferencial de curvas e superficies. *Rio de Janeiro: IMPA*, 1976.
- [17] Frank Morgan. *Riemannian Geometry: A Beginners Guide*. AK Peters/CRC Press, 1998.
- [18] Steven H Simon. *The Oxford solid state basics*. OUP Oxford, 2013.
- [19] Paul M Chaikin, Tom C Lubensky, and Thomas A Witten. *Principles of condensed matter physics*, volume 1. Cambridge university press Cambridge, 1995.
- [20] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, 1998.
- [21] Giulio Ferrari, Andrea Bertoni, Guido Goldoni, and Elisa Molinari. Cylindrical two-dimensional electron gas in a transverse magnetic field. *Physical Review B*, 78(11):115326, 2008.

-
- [22] Ulas C Coskun, Tzu-Chieh Wei, Smitha Vishveshwara, Paul M Goldbart, and Alexey Bezryadin. h/e magnetic flux modulation of the energy gap in nanotube quantum dots. *Science*, 304(5674):1132–1134, 2004.
- [23] B Lassagne, Jean-Pierre Cleuziou, S Nanot, W Escoffier, R Avriller, S Roche, L Forró, B Raquet, and J-M Broto. Aharonov-bohm conductance modulation in ballistic carbon nanotubes. *Physical review letters*, 98(17):176802, 2007.