

Universidade Federal do Maranhão
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Luís Fernando Carvalho Pereira

**Estados eletrônicos, magnetização e corrente persistente
em anéis e pontos quânticos controlados por curvatura e
rotação**

São Luís

2021

Luís Fernando Carvalho Pereira

**Estados eletrônicos, magnetização e corrente persistente
em anéis e pontos quânticos controlados por curvatura e
rotação**

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

Orientador: Edilberto Oliveira Silva

São Luís

2021

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

Pereira, Luís Fernando Carvalho.

Estados eletrônicos, magnetização e corrente persistente em anéis e pontos quânticos controlados por curvatura e rotação / Luís Fernando Carvalho Pereira. - 2021.

126 f.

Orientador(a): Edilberto Oliveira Silva.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-graduação em Física/ccet, Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2021.

1. Anel e ponto quânticos. 2. Corrente persistente. 3. Curvatura. 4. Força inercial. 5. Magnetização. I. Silva, Edilberto Oliveira. II. Título.

Luís Fernando Carvalho Pereira

**Estados eletrônicos, magnetização e corrente persistente
em anéis e pontos quânticos controlados por curvatura e
rotação**

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

Trabalho aprovado. São Luís, novembro de 2021:

**Prof. Edilberto Oliveira Silva
(Orientador)**

Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Manoel Messias Ferreira Jr.

Universidade Federal do Maranhão

**Prof. Dr. Rodolfo Alván Casana
Sifuentes**

Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Eduardo Costa Girão

Universidade Federal do Piauí

Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt

Universidade Federal Fluminense

São Luís

2021

Este trabalho é dedicado aos meus pais e irmã.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Wilson Pereira e Maria da Graça Carvalho Pereira, e a minha irmã Keila Maria Carvalho Pereira. Pelas inúmeras palavras de incentivo, um especial agradecimento a minha tia Ednolia, a minha madrinha Socorro e a minha irmã Rosete.

Ao professor Edilberto Oliveira Silva, pelo incentivo e confiança. As inúmeras reuniões que tivemos, nas quais discutimos resultados dos trabalhos e outros assuntos relacionados à pesquisa acadêmica, foram muito enriquecedoras para minha formação. Mas, nesses momentos, também houve espaço para a descontração, e aí entrou o lado amigo.

Aos colegas de curso. De fato, estivemos juntos nas árduas horas de estudo, sempre um apoiando o outro.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Física. Na parte administrativa, Lucimary sempre se mostrou solícita. Quanto aos professores, estes sempre foram atenciosos e preocupados em desempenhar o melhor possível o papel de transmitir o conhecimento. Um especial agradecimento ao professor Rodolfo Alván Casana Sifuentes. Não raros foram os momentos em que ele indagava sobre minha pesquisa, sempre prestativo em contribuir com alguma informação.

Aos professores da banca de defesa de dissertação por aceitarem o convite e por terem contribuído com boas informações e dicas para a versão final desse trabalho.

Por fim, a CAPES pelo suporte financeiro durante todo o Mestrado.

Resumo

Embarcamos na investigação dos efeitos da curvatura e das forças inerciais em um gás de elétron sem spin e não interativo confinado em sistemas mesoscópicos. No primeiro caso, o procedimento de quantização *camada fina* (thin-layer quantization) é considerado para estudar as implicações físicas devido aos efeitos de curvatura no espectro, magnetização e corrente persistente de anéis quânticos e pontos quânticos, ambos na presença de campos magnéticos externos. Nesse procedimento, surge um potencial induzido pela geometria, que depende das curvaturas média e Gaussiana. Para um anel com dimensões mesoscópicas, os efeitos do potencial geométrico no espectro de energia são desprezíveis. Na magnetização, as oscilações de Aharonov-Bohm (AB) e Haas-van Alphen (dHvA) são observadas, enquanto na corrente persistente apenas oscilações do tipo AB são observadas. Em ambas as propriedades físicas, a curvatura aumenta a amplitude das oscilações. Por outro lado, em um ponto quântico, entre as várias implicações físicas devido à curvatura do sistema, podemos citar a ausência do estado $m = 0$. Isso afeta a energia de Fermi e , conseqüentemente, a magnetização e a corrente persistente do modelo. No estudo de magnetização e correntes persistentes, descobrimos que oscilações do tipo AB estão presentes, enquanto oscilações do tipo dHvA não são bem definidas. No segundo caso, analisamos como os efeitos inerciais podem afetar várias propriedades dos sistemas mesoscópicos. Partindo da equação de Schrödinger em um referencial girante, descrevemos a influência dos efeitos não inerciais nas propriedades físicas dos anéis quânticos, 1D e 2D, na presença de um campo magnético uniforme. No anel quântico 1D, estudamos como os estados eletrônicos são afetados pela rotação e, em seguida, investigamos como a corrente persistente e a magnetização no anel são influenciadas pelos efeitos da temperatura e da rotação. As oscilações do tipo AB são observadas. Para o anel quântico 2D, destacamos que o potencial usado para descrever o modelo implica no aparecimento de estados de bordas e estados de Landau (*bulk states*). É conhecido na literatura que (*bulk states*) não transportam corrente. Como o caso mais relevante, relatamos que existe uma corrente transportada pelos (*bulk states*), a qual se deve à rotação do anel.

Palavras-chave: Oscilações do tipo Aharonov-Bohm (AB), Oscilações do tipo de Haas-van Alphen (dHvA), Anel quântico, Ponto quântico, Magnetização, Corrente persistente, Curvatura, Potencial Geométrico, Força inercial, Rotação, Estados de borda. Estados de Landau.

Abstract

We embark on an investigation of the effects of curvature and inertial forces in a non-interacting spinless electron gas confined in mesoscopic systems. In the first case, the thin-layer quantization procedure is considered to study the physical implications due to curvature effects on the spectrum, magnetization, and persistent current of quantum rings and quantum dots both in the presence of external magnetic fields. In such procedure, it arises a geometry induced potential, which depends on both the mean and the Gaussian curvatures. For a ring with a mesoscopic size, the effects of the geometry potential on the energy spectrum are negligible. In magnetization, Aharonov-Bohm (AB) and Haas-van Alphen (dHvA) oscillations are observed, while in persistent current only AB-type oscillations are observed. Both physical properties, curvature increases the amplitude of oscillations. On the other hand, at a quantum dot, among the various physical implications due to the curvature of the system, we can mention the absence of the state $m = 0$. This affects the Fermi energy and, consequently, the magnetization and the persistent current of the model. In the study of magnetization and persistent currents, we found that AB-type oscillations are present, while dHvA-type oscillations are not well defined. In the second case, we analyze how inertial effects can affect several properties of mesoscopic systems. Starting from the Schrödinger equation in a rotating frame, we describe the influence of noninertial effects on the physical properties of quantum rings, 1D and 2D, in the presence of a uniform magnetic field. For 1D quantum ring, we study how electronic states are affected by rotation, and then we investigate how persistent current and magnetization in the ring are influenced by temperature and rotation effects. AB-type oscillations are observed. For 2D quantum ring, we highlight that the potential used to describe the model implies in the appearance of edge states and Landau states (bulk states). It is known in the literature that bulk states do not carry current. As the most relevant case, we report that there is a current carried by the bulk states, which is due to the rotation of the ring.

Keywords: Aharonov-Bohm (AB) type oscillations, de Haas-van Alphen (dHvA) type oscillations, Quantum ring, Quantum dot, Magnetization, Persistent Current, Curvature, Geometric Potential, Inertial force, Rotation, Edge states, Landau states.

Lista de Figuras

Figura 1 – Energia, dada pela Eq. (3.20), como uma função do parâmetro l . A energia é dada em unidade de $\hbar^2/2\mu r_0^2$. (a) Em as linhas preta, vermelha, verde e azul descrevem o comportamento dos estados $m = -1$, $m = 0$, $m = 1$ e $m = 2$, respectivamente. Em (b), a linha vermelha denota o comportamento da energia de Fermi para o caso de três elétrons. Podemos ver que os elétrons tendem a ocupar sempre os estados de energias menores à medida que aumentamos o valor de l	37
Figura 2 – O comportamento da corrente persistente, dada pela Eq. (3.27), em um anel 1D em função do parâmetro l . Em (a), consideramos o caso em que há três elétrons, enquanto que em (b) há quatro elétrons.	40
Figura 3 – O potencial efetivo, dado pela Eq. (3.37), de alguns estados em função da distância radial, quando o campo magnético é $B = 1.0$ Tesla. Podemos ver que os estados simétricos ocupam a mesma posição, mas a energia mínima é nula se $m \geq 0$ e não nula se $m < 0$	43
Figura 4 – Os 4 primeiros níveis de Landau em função do número quântico m para $B = 1.0$ Tesla. As energias são dadas pela Eq. (3.48). Os pontos representam os estados. Note que os estados com $m < 0$ degeneram em níveis diferentes.	45
Figura 5 – A energia de Fermi de uma amostra mesoscópica retangular. A curva acima é obtida a partir do fator de preenchimento, o qual corresponde ao número de níveis de Landau ocupados [1, 2].	47
Figura 6 – Superfície cônica de déficit angular γ	53
Figura 7 – Esboços dos potenciais radial (linha preta sólida) e parabólico (linha vermelha) dados pelas Eqs. (2.3) e (2.9), respectivamente. O potencial radial descreve um anel de raio médio $r_0 = 132$ nm. O potencial parabólico é definido com $\hbar\omega_0 = 1.8$ meV.	58
Figura 8 – As energias de um anel 2D, dadas pela Eq. (5.14), em função do número quântico m para alguns valores de α e uma energia de Fermi de $E_F = 8$ meV. Quando $B = 0$, as sub-bandas são todas simétricas. Para $B \neq 0$, a simetria é quebrada e o distanciamento entre as sub-bandas vizinhas aumenta. A presença da curvatura faz com que os efeitos do campo magnético sejam intensificados.	60

Figura 9 – Níveis de energia dos estados (Eq. (5.14)) de uma sub-banda com $n = 0$ para uma energia de Fermi $E_F = 8$ meV (veja a Fig. 8). Para $B = 0$ Tesla, cada horizontal linha corresponde a dois níveis de energia devido à simetria. O aumento da energia dos estados para $\alpha < 1$, resulta na redução no número de estados abaixo da energia de Fermi. Podemos ver que o estado $E_{0,0}$ tem um pequena redução de energia, quando α diminui. Para $B = 1$ Tesla, podemos observar um aumento na energia mínima da sub-banda quando $\alpha < 1$. Esse mínimo tende a aumentar para valores de α cada vez menores.	61
Figura 10 – Autovalores de energia de um anel 2D, dados pela Eq. (5.14), em função do campo magnético para alguns valores do parâmetro α . O campo magnético altera o mínimo das sub-bandas e aumenta o espaçamento de energia entre as sub-bandas adjacentes. A curvatura intensifica esses dois efeitos. Observe que as sub-bandas são despovoadas mais rapidamente quando α diminui. . .	62
Figura 11 – Autovalores de energia de uma anel 2D, dados pela Eq. (5.14), como uma função do fluxo magnético de AB para alguns valores do parâmetro α . Os estados de energia são dados por um conjunto de quase parábolas com centros localizados em $m = l$	63
Figura 12 – O raio dos estados de um anel 2D (linhas pontilhadas), dado pela Eq. (5.18), como uma função do número quântico m para alguns valores do campo magnético e também do parâmetro α . As linhas contínuas representam a região condutora ocupada bem como os estados que estão abaixo da energia de Fermi, a qual consideramos como sendo $E_F = 8$ meV.	64
Figura 13 – Densidade de probabilidade como uma função da coordenada radial para alguns estados (Eq. (5.15)) da sub-banda com $n = 0$ e para o parâmetro $\alpha = 0.7$	66
Figura 14 – Densidade de probabilidade em função do campo magnético para os estados (Eq. (5.15)) da sub-banda com $n = 0$ para $\alpha = 0.7$	66
Figura 15 – Densidade de probabilidade como uma função da coordenada radial de alguns estados (Eq. (5.15)). Consideramos a sub-banda com $n = 0$ e alguns valores do parâmetro α . Em (a), mostramos o perfil da densidade de probabilidade com $m = 5$ e o campo magnético nulo. Nos painéis (b), (c) e (d), consideramos os estados com $m = 20$, $m = 5$ e $m = 0$, respectivamente, e $B = 1.0$ Tesla. . .	67
Figura 16 – Perfil do potencial radial (linha preta sólida) e do potencial parabólico (linha vermelha sólida) dados pelas Eqs. (2.3) e (2.9), repectivamente. O potencial radial descreve um anel de raio médio $r_0 = 1350$ nm , enquanto o potencial parabólico é definido por $\hbar\omega_0 = 2.23$ meV.	68

Figura 17 – A energia de Fermi a temperatura zero em função do campo magnético (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)). Quando α diminui, verifica-se um maior número de sub-bandas ocupadas e também o aumento da energia de Fermi. Além disso, há uma mudança nos máximos das oscilações.	69
Figura 18 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), em função do campo magnético para vários valores de α . Podemos observar tanto as oscilações do tipo-AB quanto as oscilações do tipo-dHvA. A curvatura aumenta a amplitude dessas oscilações, como pode ser inferido ao comparar as diferentes escalas verticais. Além disso, observe que o máximos das oscilações do tipo-dHvA são deslocados para valores mais baixos do campo magnético quando $\alpha < 1$	70
Figura 19 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), no regime de campos magnéticos fracos. As oscilações são do tipo-AB. A amplitude aumenta à medida que α diminui.	71
Figura 20 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), no regime de campos magnéticos fortes. As oscilações são do tipo-AB.	71
Figura 21 – O efeito da temperatura sobre as oscilações do tipo AB observadas na magnetização, a qual é dada pela Eq. (5.22). Consideramos o parâmetro $\alpha = 0.7$ e o regime de campos magnéticos fracos. O perfil revela que a magnetização é uma função suave do campo magnético para $T > 0$. A amplitude diminui à medida que a temperatura aumenta.	72
Figura 22 – Corrente persistente do anel quântico, dada pela Eq. (5.25), em função da intensidade do campo magnético. Existem apenas oscilações do tipo-AB em toda a faixa do campo magnético. Para intensidades menores de B , a amplitude inicial da corrente persistente torna-se maior.	73
Figura 23 – Corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de campos magnéticos fracos. Seu perfil é semelhante ao da magnetização (veja o comentário depois da Eq. (5.27)). A amplitude das oscilações aumenta quando o parâmetro α diminui.	74
Figura 24 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de campos magnéticos fortes. A curvatura desloca o máximo das oscilações na horizontal, mas não impõe nenhum efeito sobre o máximo das amplitudes.	74
Figura 25 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de fortes campos magnéticos para $\alpha = 0.7$. A corrente persistente é uma função suave do campo magnético quando $T > 0$. A amplitude diminui à medida que a temperatura aumenta.	75

Figura 26 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), em função do número de elétron N para os parâmetros $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 1.0$. Consideramos $B = 1 \times 10^{-4}$ Tesla. Quando dois novos ramos aparecem, outra sub-banda passa a ser ocupada. O número de sub-bandas ocupadas, para $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 1.0$ é diferente em alguns intervalos de N	76
Figura 27 – Níveis de energia de um ponto quântico, dados pela Eq. (6.3), em função do número quântico m no regime de campos magnéticos fracos. Consideramos as cinco primeiras sub-bandas ($n = 0, 1, 2, 3, 4$). Em (a) e (b) temos o caso em que $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 1.0$, respectivamente. Em (c) e (d), usamos $\alpha = 0.5$	81
Figura 28 – Níveis de energia de um ponto quântico, dados pela Eq. (6.3), em função do campo magnético. As linhas pretas representam o comportamento da energia de Fermi para o caso em que há 20 elétrons na amostra. As linhas tracejadas correspondem ao estado de energia $E_{0,-1}$	82
Figura 29 – Energia de Fermi na temperatura zero (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em um ponto quântico em função do campo magnético.	83
Figura 30 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), em função do campo magnético.	84
Figura 31 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), no intervalo de campos magnéticos fracos.	84
Figura 32 – Magnetização em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), quando a sub-banda com $n = 1$ é despovoada.	85
Figura 33 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), como uma função do campo magnético. A amplitude das oscilações do tipo AB depende do parâmetro α	85
Figura 34 – Corrente persistente de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), em função do campo magnético.	87
Figura 35 – Corrente persistente em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), no regime de campo magnético fraco.	88
Figura 36 – Visualização tridimensional da corrente persistente de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), em função do campo magnético	88
Figura 37 – Perfil da corrente persistente em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), quando a sub-banda com $n = 1$ é desocupada. Para $\alpha < 1$, a desocupação não ocorre na amplitude máxima.	89
Figura 38 – Esquema de um elétron descrevendo um caminho circular de raio constante r_0 com velocidade \mathbf{v} na presença de um campo magnético uniforme \mathbf{B} . O campo magnético é aplicado perpendicular ao plano do movimento do elétron.	92

- Figura 39 – Energia de um anel 1D, dada pela Eq. (7.15), como uma função de Φ'/Φ_0 para o caso sem e com rotação. Consideramos anéis com raios (a) $r_0 = 100$ nm e (b) $r_0 = 400$ nm. Note que para $\Phi'/\Phi_0 = 0$ os autovalores são duplamente degenerados, exceto para $m = 0$. As linhas contínuas descrevem o comportamento da energia de Fermi quando há um único elétron no anel 1D. 94
- Figura 40 – Na Fig. (a), mostramos a energia de um anel 1D, dada pela Eq. (7.15), em função de Ω and m . Na Fig. (b), ilustramos a energia em função de Ω , enfatizando apenas os estados com $m = \pm 1$. Nas duas figuras consideramos um anel de raio $r_0 = 400$ nm. 96
- Figura 41 – Energia de um Fermi (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) de um único elétron em função de Φ'/Φ_0 e Ω 96
- Figura 42 – Corrente persistente em um anel 1D, dada pela Eq. (7.22), em função de l' Ω , (a) $T = 0$, (b) $T = 3$ mK. Em (c), a corrente persistente em função de l' para $\Omega = -1.0$ GHz (linhas vermelhas contínua e tracejada), $\Omega = 0$ Hz (linhas verdes contínua e tracejada) e $\Omega = 1.0$ GHz (linhas azuis contínua e tracejada). As linhas contínua e tracejadas correspondem à $T = 0$ K e $T = 1.0$ mK, respectivamente. 97
- Figura 43 – (a) Magnetização em um anel 1D, dada pela Eq. (7.23), em função de l' e Ω a temperatura zero. (b) A amostra está mantida a uma temperatura de $T = 3$ mK. (c) Esboços da magnetização para $\Omega = -1.0$ GHz, $\Omega = 0$ Hz e $\Omega = 1.0$ GHz. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às temperaturas de $T = 0$ K e $T = 1.0$ mK, respectivamente. 99
- Figura 44 – Potencial efetivo, dado pela Eq. (8.7), em função da distância radial r . Em (b), (c) e (d), as linhas tracejadas correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. Em (a), vemos que os estados simétricos têm a mesma posição radial, enquanto que em (b), e (d), os pontos de mínimo são deslocados para menores valores de r quando $\Omega > 0$. Por outro lado, para $\Omega < 0$, os estados tendem a ocupar posições radiais maiores. Além disso, em (b), (c) e (d) também observamos que os efeitos sobre o potencial mínimo do estados mais baixos são mais evidentes para os estados com $m < 0$ 102
- Figura 45 – Potencial efetivo, dado pela Eq. (8.7), em função da distância radial r . Mostramos o potencial efetivo dos estados positivos $m = 10$ (linha contínua preta), $m = 30$ (linha contínua vermelha) e $m = 50$ (linha contínua verde). Em (b), (c) e (d), as linhas tracejadas correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. Podemos observar um maior efeito da rotação nos estados com $m > 0$ 103
- Figura 46 – Energias, dadas pela Eq. (8.11), em função do número quântico m para $B = 0.1$ Tesla. Podemos observar a formação dos primeiros quatro níveis de Landau. Além disso, é possível ver os efeitos da energia potencial V_m , dada pela Eq. (8.9), nos estados com $m > 0$ e $m < 0$ para diferentes valores de Ω . 104

Figura 47 – Densidade de probabilidade de alguns estados (Eq. (8.10)) em função de r para $B = 1.0$ Tesla. As linhas tracejadas em (b), (c) e (d) correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. A amplitude máxima da densidade de probabilidade se desloca para menores valores de r à medida que Ω aumenta.	104
Figura 48 – Idealização de um gás de elétrons bidimensional confinado em um anel girando e sujeito a um campo magnético uniforme perpendicular à amostra. Além disso, há um fluxo de AB atravessando a amostra ao centro (solenóide localizado).	105
Figura 49 – Níveis de energia de um anel 2D, dados pela Eq. (8.8), em função da posição radial r_m , dada pela Eq. (8.8). Consideramos o campo magnético $B = 1.0$ Tesla. As linhas pretas pontilhadas (verticais) correspondem aos raios do anel, dados por $r_- = 540$ nm e $r_+ = 810$ nm. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d), correspondem ao caso em que $\Omega = 0$	107
Figura 50 – Energia de Fermi de um anel 2D (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em função do número de elétrons. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d), correspondem ao caso em que $\Omega = 0$	108
Figura 51 – Energia de Fermi de um anel 2D (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em função do campo magnético. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d) correspondem ao caso em que $\Omega = 0$	109

Lista de publicações

ORIGINAL PAPER

annalen
der
physik
www.ann-phys.org

Modifications of Electron States, Magnetization, and Persistent Current in a Quantum Dot by Controlled Curvature

Luís Fernando C. Pereira, Fabiano M. Andrade,* Cleverson Filgueiras, and Edilberto O. Silva

The thin-layer quantization procedure is used to study the physical implications due to curvature effects on a quantum dot in the presence of an external magnetic field. Among the various physical implications due to the curvature of the system, the absence of the $m = 0$ state is the most relevant one. This absence affects the Fermi energy and consequently the thermodynamic properties of the system. In the absence of magnetic fields, it is verified that the rotational symmetry in the lateral confinement is preserved in the electronic states of the system and its degeneracy concerning the harmonicity of the confining potential is broken. In the presence of a magnetic field, however, the energies of the electronic states in a quantum dot with curvature are greater than those obtained for a quantum dot in a flat space, and the profile of degeneracy changes when the field is varied. It is shown that the curvature of the surface modifies the number of subbands occupied in the Fermi energy. In the study of both magnetization and persistent currents, it is observed that Aharonov–Bohm-type oscillations are present, whereas de Haas–van Alphen-type oscillations are not well defined.

confined laterally by a potential acting in all directions of the surface.^[1] They are also known as artificial atoms where the lateral confining potential replaces the potential of the nucleus.^[2] Such confining potential may be, for instance, yielded by a hard-wall or even by a harmonic oscillator-type parabolic potential. The energy spectrum then is fully discrete and it can be studied by experiments of transport phenomena if the dot is weakly coupled to wide 2DEG regions by tunnel barriers. At zero temperature, the free energy is just the total energy of the system.

The application of a magnetic field perpendicular to the surface of a quantum dot redefines the state of free energy. Then, the thermodynamic properties of the system as, for example, the magnetization, can be calculated.^[3] Another property that results of the application of a magnetic field is the persistent current.

However, we must remember that persistent currents were originally defined in a quantum ring as a result of the Aharonov–Bohm (AB) flux through the hole,^[4,5] which modifies the boundary conditions of the wave function. Consequently, all properties of the system are periodic functions of the AB flux. Therefore, for a multiply connected geometry, we can calculate the persistent current using the Byers–Yang relation.^[6] For a quantum dot, it is not a problem, although it is a simply connected structure, as long as the wave functions states are zero in the $r = 0$ region. If this does not occur, we can calculate the persistent currents using the definition of the current density operator, as done in ref. [6], where the authors investigated the persistent currents of a quantum dot in the strong magnetic field regime. An alternative procedure to calculate this quantity at the quantum dot was accomplished in ref. [7] as a limiting case of that obtained for the quantum ring, and subsequently recovering the result found in ref. [6].

A 2DEG does not necessarily have to be a planar system. Technological developments have made it possible to fabricate nano-objects of various shapes.^[8,9] In ref. [10] the synthesis of semiconductor nanocoils with a controllable apex angle was described. These achievements have attracted great interest, both in the experimental and theoretical points of view, when a 2DEG is held

1. Introduction

Quantum dots are simply connected systems in which a 2D electron gas (2DEG) that is free to move on a flat surface is

L. F. C. Pereira, Prof. E. O. Silva
Departamento de Física
Universidade Federal do Maranhão
65085-580 São Luís, Maranhão, Brazil
Prof. F. M. Andrade
Departamento de Matemática e Estatística
Universidade Estadual de Ponta Grossa
84030-900 Ponta Grossa, Brazil
E-mail: fmandrade@uepg.br
Prof. C. Filgueiras
Departamento de Física
Universidade Federal de Lavras
Caixa Postal 3037 37200-000 Lavras, Minas Gerais, Brazil
Prof. C. Filgueiras
Departamento de Física
Universidade Federal da Paraíba
Caixa Postal 5008 58051-900 João Pessoa, Paraíba, Brazil

The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/andp.201900254>
DOI: 10.1002/andp.201900254

Ann. Phys. (Berlin) 2019, 531, 1900254

1900254 (1 of 9)

© 2019 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Physica E 132 (2021) 114760

Contents lists available at ScienceDirect



Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures

journal homepage: <http://www.elsevier.com/locate/physxe>



Study of electronic properties, magnetization and persistent currents in a mesoscopic ring by controlled curvature

Luís Fernando C. Pereira^a, Fabiano M. Andrade^b, Cleverson Filgueiras^c, Edilberto O. Silva^{a,*}

^a Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, 65085-580, São Luís, Maranhão, Brazil

^b Departamento de Matemática e Estatística, Universidade Estadual de Ponta Grossa, 84030-900, Ponta Grossa, Paraná, Brazil

^c Departamento de Física, Universidade Federal de Lavras, Caixa Postal 3037, 37200-000, Lavras, Minas Gerais, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:
Quantum ring
Aharonov–Bohm
de Haas–van Alphen
Curved surface
Persistent current
Magnetization

ABSTRACT

We study the model of a noninteracting spinless electron gas confined to the two-dimensional localized surface of a cone in the presence of external magnetic fields. The localized region is characterized by an angular radial potential. We write the Schrödinger equation and use the thin-layer quantization procedure to calculate the wavefunctions and the energy spectrum. In such a procedure, it arises a geometry induced potential, which depends on both the mean and the Gaussian curvatures. Nevertheless, since we consider a ring with a mesoscopic size, the effects of the Gaussian curvature on the energy spectrum are negligible. The magnetization and the persistent current are analyzed. In the former, we observed the Aharonov–Bohm (AB) and de Haas–van Alphen (dHvA) types oscillations. In the latter, it is observed only the AB type oscillations. In both cases, the curvature increases the amplitude of the oscillations.

Artigos no arXiv

Effects of curvature on the electronic states of a two-dimensional mesoscopic ring

Luís Fernando C. Pereira,^{1,*} Fabiano M. Andrade,^{2,†} Cleverson Filgueiras,^{3,4,‡} and Edilberto O. Silva^{1,§}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão,
65085-580, São Luís, Maranhão, Brazil*

²*Departamento de Matemática e Estatística, Universidade Estadual de Ponta Grossa,
84030-900, Ponta Grossa, Paraná, Brazil*

³*Departamento de Física, Universidade Federal de Lavras,
Caixa Postal 3037, 37200-000, Lavras, Minas Gerais, Brazil*

⁴*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba,
Caixa Postal 5008, 58051-900, João Pessoa, Paraíba, Brazil*

(Dated: November 4, 2019)

The effects of surface curvature on the motion of electrons in a mesoscopic two-dimensional ring on a cone in the presence of external magnetic fields are examined. The approach follows the thin-layer quantization procedure, which gives rise to a geometry induced potential. Due to the annular geometric shape of the sample, only the mean curvature has relevant effects to the model. Nevertheless, the most significant contribution of the mean curvature occurs in the state $m = 0$, which tends to decrease the energies when the magnetic field is null. The effects of curvature are also manifested in the cyclotron frequency as well as in the effective angular momentum through the α parameter, which can be controlled in such a way that the magnitude of these effects becomes explicit. This is verified in the energies and wave functions of the system. A decrease in the number of occupied states in the Fermi energy is observed. As a consequence, there is an alteration in the radial range of the conducting region of the sample. This fact is confirmed by studying the variations in the radii of the states.

PACS numbers: 68.65.-k, 71.70.Di, 73.21.-b, 73.22.-f

nes-hall] 31 Oct 2019

Influence of rotation on the electronic states, magnetization and persistent current in 1D quantum ring

Luís Fernando C. Pereira, Márcio M. Cunha, Edilberto O. Silva

Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, Campus Universitário do Bacanga, 65085-580 São Luís-MA, Brazil

Abstract

Inertial effects can affect several properties of physical systems. In particular, in the context of quantum mechanics, such effects have been studied in diverse contexts. In this paper, starting from the Schrödinger equation for a rotating frame, we describe the influence of rotation on the energy levels of a quantum particle constrained to a one-dimensional ring in the presence of a uniform magnetic field. We also investigate how the persistent current and the magnetization in the ring are influenced by temperature and rotating effects.

Keywords: Quantum ring, Rotating effects, Magnetization, Persistent current

ph] 5 Dec 2019

Sumário

1	INTRODUÇÃO	18
2	POTENCIAIS DE CONFINAMENTO	28
3	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	32
3.1	O problema do calibre	33
3.2	O campo de AB: O fluxo central	35
3.2.1	Corrente persistente	38
3.3	O calibre simétrico	41
4	A MECÂNICA QUÂNTICA DE UMA PARTÍCULA EM UMA SUPERFÍCIE CURVA	48
4.1	A equação de Schrödinger reformulada	48
4.2	A métrica do cone	52
5	EFEITOS DE CURVATURA NA ENERGIA DOS ESTADOS, NA MAGNETIZAÇÃO E CORRENTE PERSISTENTE DE UM ANEL MESOSCÓPICO	55
5.1	As autofunções e os autovalores de energia	56
5.2	Propriedades físicas. Análise numérica	58
5.3	Magnetização	67
5.4	Corrente persistente	71
6	EFEITOS DE CURVATURA NA ENERGIA DOS ESTADOS, NA MAGNETIZAÇÃO E CORRENTE PERSISTENTE DE PONTOS QUÂNTICOS	77
6.1	Autofunções e os autovalores de energia de um ponto quântico	77
6.2	Análise dos estados eletrônicos de um ponto quântico	79
6.3	Magnetização em pontos quânticos	82
6.4	Corrente persistente em pontos quânticos	86
7	EFEITOS DE ROTAÇÃO NOS ESTADOS ELETRÔNICOS DE UM ANEL QUÂNTICO 1D	90
7.1	Os autovalores e autofunções	90
7.2	Propriedades eletrônicas	93
7.3	Corrente persistente	96

7.4	Magnetização	98
8	EFEITOS DE ROTAÇÃO NOS ESTADOS ELETRÔNICOS DE UM ANEL QUÂNTICO 2D	100
8.1	Níveis de Landau	100
8.2	Estados eletrônicos de um anel quântico bidimensional	105
9	CONCLUSÃO	111
	REFERÊNCIAS	114

1 Introdução

Os dispositivos eletrônicos cujas dimensões encontram-se entre as dimensões macroscópicas e microscópicas são chamados de mesoscópicos. Esses sistemas caracterizam-se por certas escalas de comprimento e energia. Quando um dispositivo atinge o regime mesoscópico, novos efeitos ocorrem, os quais podem mudar profundamente a performance do sistema [1]. O tamanho do dispositivo deve ser da ordem ou menor do que o livre caminho médio λ_e do elétron, o qual equivale a distância média que um elétron percorre antes que ele seja espalhado, isto é, antes que o momento inicial seja modificado. Se os elétrons estão confinados em regiões comparáveis ao comprimento de onda de Fermi, $\lambda_F = \sqrt{2\mu E_F}$, então efeitos quânticos aparecem [1, 3]. O comprimento de onda de Fermi corresponde ao comprimento de onda de de Broglie dos elétrons na esfera de Fermi [1, 4]. O confinamento pode ocorrer em uma única direção, por exemplo ao longo do eixo z . Nesse caso, dizemos que a partícula se move livremente no plano, ou seja, seu movimento é bidimensional; há dois graus de liberdade. Isso resulta na formação um gás de elétrons bidimensional (2DEG). As estruturas mesoscópicas que obedecem a essa característica são conhecidas como filmes quânticos. Se uma segunda direção também for da ordem do comprimento de Fermi, então o movimento é dito ser unidimensional; há um grau de liberdade. Podemos, por exemplo, confinar a partícula ao longo dos eixos y e z , de modo que a partícula tem movimento ilimitado paralelo ao eixo x . Forma-se um gás de elétrons unidimensional (1DEG). Essa situação representa os fios quânticos. Por fim, se as três direções forem da ordem do comprimento de Fermi, a partícula está confinada nas três direções; não há graus de liberdade. Nesse caso, ocorre a formação de um gás de elétrons de dimensão zero (0DEG)¹. O modelo resultante caracteriza-se como um ponto quântico [1, 3]. Destacamos que em sistemas reais o confinamento nunca é perfeito. Por exemplo, considere o caso em que os elétrons estão confinados ao longo do eixo- z em um pequeno intervalo, o qual é da ordem de λ_F . Usando o potencial do tipo poço infinito, é possível mostrar a quantização dos estados de energias nessa direção [5]. Se os elétrons ocupam somente o estado mais baixo de energia, então temos a situação ideal da formação de um 2DEG. Caso os elétrons também ocupem outros níveis de energia, então dizemos que há a formação de um quasi-2DEG [1, 3]. Neste trabalho, estamos interessados em sistemas ideais. Um importante resultado que emerge da dimensionalidade do gás de elétrons é a densidade de estados. A densidade de estados é constante para um 2DEG, enquanto que, para um 1DEG, ela é proporcional à $E^{-1/2}$, onde E é a energia [3, 6]. Para um 0DEG, a densidade de estados é não nula somente para determinados valores de energia E_i ($i = 0, 1, \dots$), sendo dada explicitamente por $\delta(E - E_i)$ [3, 6], onde $\delta(x)$ é a função

¹ Em inglês, temos as denominações “two-dimensional electron gas”, “one-dimensional electron gas” e “zero-dimensional electron gas”. Daí as siglas 2DEG, 1DEG e 0DEG, respectivamente.

delta de Dirac.

Outra escala importante é o comprimento de coerência de fase λ_ϕ . Caso as dimensões do dispositivo sejam da ordem de λ_ϕ , então efeitos de interferência são visíveis. Um exemplo disso são as oscilações observadas na medida da resistência em função do campo magnético. Ocorre que o campo magnético modifica o padrão de interferência das ondas eletrônicas que atravessam os dois caminhos do anel resultando nas oscilações [7, 8]. Essas oscilações correspondem ao análogo do efeito AB [9] em Matéria Condensada. Ressaltamos que, além das escalas de comprimentos comentadas acima, a temperatura afeta o comportamento dos fenômenos físicos de sistemas mesoscópicos. Por exemplo, a observação do efeito AB ocorre porque em baixas temperaturas o comprimento de onda de fase λ_ϕ torna-se da ordem do tamanho do dispositivo [7]. O aumento da temperatura resulta em uma diminuição de λ_ϕ e, conseqüentemente, as oscilações são danificadas [10, 11]. Outro mecanismo que leva a uma redução da amplitude das oscilações de AB com a temperatura é a média de energia do *ensemble*, a qual domina quando o comprimento de coerência de fase é maior do que o tamanho do anel [10, 12]. Na presença de campos magnéticos, temos ainda uma outra escala importante, o chamado comprimento magnético $\lambda_B = \sqrt{\hbar/eB}$, onde B é a magnitude do campo magnético uniforme.

Os trabalhos mais recentes em sistemas mesoscópicos são baseados em heterojunções do tipo GaAs-AlGaAs, visto que na interface entre esses dois materiais ocorre a formação de uma fina camada condutora 2D de alta qualidade. O gás de elétrons formado na interface tem uma densidade eletrônica que varia no intervalo de $2 \times 10^{11}/\text{cm}^2$ a $2 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, e uma mobilidade da ordem de $10^6 \text{ cm}^2/\text{V s}$. O confinamento de um gás de elétrons em anéis quânticos é um problema bastante estudado em Física da Matéria Condensada e de interesse atual. A razão disso está nos inúmeros fenômenos físicos observados nessas estruturas quando os comprimentos característicos são da ordem do tamanho dos dispositivos mesoscópicos. Podemos acessar propriedades de transporte, como por exemplo, a magnetoresistência, já comentada anteriormente, através da aplicação de um campo magnético [7, 13, 14, 15]. Essas estruturas mesoscópicas também nos permitem estudar propriedades óticas. Na Ref. [16], os autores estudaram a seção transversal de fotoionização em um anel quântico 2D. As propriedades óticas de um exciton em um anel bidimensional atravessado por um fluxo magnético são estudadas na Ref. [17]. Uma característica conhecida da termodinâmica é que, à temperatura nula, a energia livre é justamente a energia total do sistema. Quando aplicamos um campo magnético uniforme perpendicular à superfície de uma amostra com dimensões mesoscópicas, a energia dos estados eletrônicos são modificadas. Conseqüentemente, a energia livre do modelo também muda. Dessa forma, outro tópico de interesse em anéis mesoscópicos são as propriedades termodinâmicas tais como a corrente persistente e a magnetização.

Podemos definir, teoricamente, um anel impondo condições de contorno às funções

de onda, isto é, impondo que elas se anulem em $r = r_-$ e $r = r_+$, onde r_- e r_+ correspondem aos raios interno e externo do anel, respectivamente. Esse modelo é conhecido na literatura como potencial de confinamento forte. O potencial do tipo oscilador harmônico deslocado também exhibe o modelo de anel [18]. Um modelo amplamente utilizado na literatura, o qual descreve um anel isolado com largura finita, foi proposto por Tan e Inkson. A grande utilidade desse modelo é a possibilidade de determinar o espectro de energia do anel quântico através de uma abordagem analítica exata [19]. Esse modelo também foi usado pelos mesmos autores para estudar outros fenômenos físicos, como magnetorresistência [14] e a corrente persistente [20]. Além disso, foi possível reproduzir alguns resultados experimentais, o que tornou o modelo bastante atraente [14, 20]. Uma generalização desse potencial foi proposto para estudar a mecânica quântica relativística de uma partícula de spin-1/2 em um anel [21, 22].

Outro tópico de interesse atual e que também é objeto de estudo nessa tese é o confinamento de uma gás de elétrons em pontos quânticos. Pontos quânticos são sistemas simplesmente conexos² [23, 24], ou seja um disco de raio R . Um gás de elétrons que se move livremente sobre uma superfície plana e confinado lateralmente por um potencial que atua em todas as direções é um exemplo de ponto quântico [25]. Eles também são conhecidos como átomos artificiais devido à semelhança no preenchimento dos níveis entre esses dois sistemas. De fato, no ponto quântico, observa-se a formação de *casca*s, as quais são ocupadas por um determinado número de elétrons similar ao que se observa nos níveis atômicos [26]. Nesse caso, o potencial de confinamento lateral corresponde ao potencial do núcleo [27]. O potencial confinante que descreve um ponto quântico pode ser, por exemplo, produzido por um potencial tipo poço quântico, isto é, impondo condições de contorno para a função de onda (potencial de confinamento forte), como no caso do anel. Outro modelo de potencial usado como confinamento é o potencial parabólico tipo oscilador harmônico. Neste caso, o espectro de energia é totalmente discreto e pode ser estudado em conexão com experimentos de fenômenos de transporte se o ponto quântico for acoplado fracamente a largas regiões de um 2DEG por barreiras de túnel. A exemplo do que ocorre com anéis isolados e imersos em campos magnéticos, podemos acessar o espectro de energia, a energia livre do modelo e conseqüentemente propriedades termodinâmicas, como a corrente persistente e magnetização.

O modelo simples de um anel 1D com um fluxo magnético passando pelo centro do anel é um exemplo de sistema mesoscópico usado para explicar a origem da corrente persistente [28, 29]. Nesse caso, a condição de contorno é modificada pelo fluxo magnético, o qual implica na periodicidade dos níveis de energia. De acordo com a relação de Byers-Yang [28], a corrente persistente é dada pela derivada da função energia livre com relação ao fluxo magnético, e portanto, é também uma função periódica do fluxo magnético.

² Por outro lado, os anéis são sistemas simplesmente não conexos.

Portanto, a dependência da energia livre com o fluxo magnético implica a existência de uma corrente termodinâmica, ou seja, uma corrente persistente [30]. Deve ser ressaltado que o cálculo da corrente de um estado de energia usando a relação de Byers-Yang está condicionado ao fato de que a função de onda seja nula em $r = 0$. Obviamente que os estados de um anel satisfazem essa condição.

É um resultado conhecido da Física Clássica que a corrente em um circuito fechado é proporcional à magnetização. Esse resultado permanece válido na Mecânica Quântica, ou seja, em um modelo de anel 1D a magnetização, a qual é obtida tomando a derivada da energia livre com relação ao campo magnético [31], é proporcional à corrente persistente [32]. Essa proporcionalidade é mantida, mesmo para um anel 2D, desde que a análise seja feita no intervalo de campos magnéticos fracos [20]. Para campos magnéticos mais fortes, a presença de um termo proporcional ao campo magnético quebra a relação clássica entre corrente e magnetização em um anel 2D.

Para o ponto quântico, ainda podemos calcular a corrente persistente usando a relação de Byers-Yang [28]. Contudo, como o ponto quântico é uma estrutura simplesmente conexa, nem todos os estados satisfazem a condição de aplicabilidade da relação de Byers-Yang. Nos casos em que a função de onda de um estado eletrônico de pontos quânticos não se anula em $r = 0$, podemos calcular a corrente persistente usando o operador densidade de corrente, como realizado na Ref. [23], onde os autores investigaram as correntes persistentes em um ponto quântico no regime de campos magnéticos fortes. Um procedimento alternativo para calcular a corrente persistente em um ponto quântico foi realizado na Ref. [20] como um caso limite da corrente persistente obtido em um anel quântico. De fato, usando esse procedimento, os autores conseguiram recuperar os resultados da Ref. [23]. A proporcionalidade entre a corrente persistente e a magnetização em pontos quânticos também é observada no regime de campos magnéticos fracos.

Quando o campo magnético varia, oscilações dos tipos Aharonov-Bohm (AB) e de Haas-van Alphen (dHvA) são observadas na corrente persistente e na magnetização em anéis e em pontos quânticos. No caso idealizado de temperatura nula, essas oscilações apresentam amplitudes máximas. Para temperaturas não nulas, observa-se uma diminuição do sinal dessas oscilações. Isso mostra que os sistemas mesoscópicos são sensíveis ao aumento de temperatura [30, 33, 34]. Ocorre que, o aumento de temperatura tende a misturar os níveis de energia em um intervalo de energia $k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Como resultado, ocorre que contribuições positivas e negativas para a corrente persistente são significativamente canceladas [30, 35, 33]. Além disso, como já foi observado acima quando comentamos sobre o efeito AB na matéria condensada, o aumento de temperatura reduz o comprimento de coerência de fase. Assim, o sistema perde a característica mesoscópica e conseqüentemente, o sinal de fenômenos físicos observados nesse regime, como é o caso da corrente persistente, diminui [30]. Resultados análogos são

observados para comportamento das oscilações dos tipos AB e dHvA na magnetização em temperaturas não nulas [36]. Além da temperatura, a presença de impurezas no material é um outro fator determinante para a ocorrência de correntes persistentes. De fato, impurezas estão presentes em amostras reais. Tal como ocorre com relação à temperatura, a presença de impurezas também diminui a amplitude das correntes persistentes. Esse resultado pode ser verificado na Ref [33], onde Cheung, usando o modelo de anel 1D, abordou o efeito da temperatura e da presença de impureza nas correntes persistentes. Cheung mostrou que a presença de impurezas tem efeitos análogos ao da temperatura, ou seja, diminui a amplitude da corrente persistente.

Um 2DEG não necessariamente deve ser um sistema planar. Desenvolvimento tecnológicos têm tornado possível fabricar nanodispositivos de formas variadas [37, 38]. Essas realizações experimentais têm atraído a atenção de pesquisadores tanto teóricos quanto experimentais, em particular, quando um 2DEG é submetido a campos fortes [39, 40]. Na Ref. [41], os autores investigaram os efeitos do campo magnético homogêneo e da impureza doadora no espectro de energia do elétron e na distribuição de sua densidade de probabilidade em pontos quânticos núcleo-camada esférica. Os modelos teóricos em meio aos avanços recentes na manipulação de nanoestruturas permitiram a fabricação de amostras quânticas em diferentes geometrias envolvendo topologias não triviais [42, 43, 44, 45, 46, 47]. Então, é crucial entender como a topologia modifica as propriedades físicas desses nanodispositivos. Do ponto de vista teórico, as implicações físicas exibidas por sistemas quânticos confinados em uma superfície curva são de grande interesse. Da Costa mostrou que quando uma partícula é vinculada a mover-se sobre uma superfície curva, ela experimenta uma energia potencial efetiva cuja magnitude depende da curvatura local ao longo da superfície [48, 49, 50]. Ele também propôs a abordagem empregada para abordar sistemas físicos desta natureza. A abordagem é baseada em um procedimento de quantização de *camada fina* e é bastante conhecida na literatura. Nos últimos anos, várias outras contribuições foram realizadas no contexto de movimento vinculado sobre uma superfície em mecânica quântica usando este procedimento [51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64]. O principal resultado descrito nessa abordagem é que, mesmo na ausência de interações de qualquer natureza, os elétrons não podem se mover livremente na superfície, ou seja, quando uma partícula é vinculada a mover-se sobre uma superfície curva, ela também experimenta um potencial de origem puramente geométrica. Esse potencial é dado em termos das curvaturas média e gaussiana e leva em conta a natureza quântica da partícula. Isso significa que podemos investigar sistema físicos mesoscópicos em geometrias curvas simplesmente controlando localmente a curvatura da geometria da superfície e então acessar as propriedades físicas de interesse. Embora o procedimento de quantização de da Costa tenha um grande consenso, principalmente na física da Matéria Condensada teórica, faltam evidências experimentais que corroborem para o modelo, especificamente, para o potencial geométrico. Contudo, um alento ocorre na Ref. [65], onde os autores

relatam o primeiro experimento de um análogo ótico de um potencial geométrico para pacotes de ondas de luz restritos a camadas finas de guias dielétricas fabricadas em dióxido de silício (SiO_2), também conhecido como sílica, pela tecnologia de gravação a laser de femtossegundo [66].

Ainda no contexto de sistemas nanométricos de formas variadas, temos as nanoestruturas de Möbius. Na Ref. [24], uma nanoestrutura Möbius é analisada e os efeitos geométricos nos autovalores de energia são discutidos incluindo dependências na largura, comprimento, espessura e tensão da nanoestrutura de Möbius. Furtado e colaboradores também contribuíram para o estudo dessas nanoestruturas, como por exemplo, na Ref. [67], onde eles examinaram a influência do fluxo AB nas propriedades físicas de baixa energia de anéis de grafeno exibindo topologia Möbius. Na Ref. [68], alguns aspectos do problema de confinamento em fitas de Möbius no contexto de aproximação de baixas energias foram investigados em uma folha de grafeno.

O estudo de defeitos em sólidos também é uma importante área de pesquisa da Física. Uma abordagem bastante usada é baseada no procedimento de Riemann-Cartan, o qual envolve métricas e torsão não triviais [69]. A Física de defeitos topológicos no volume de um sólido pode ser vista como a Física em uma geometria não trivial [70, 71, 72, 73]. A presença de um defeito linear, como por exemplo, a disclinação ou a dislocação, muda a topologia do sistema [74]. Usando o processo de Volterra [75], a disclinação é obtida removendo ou inserindo um pedaço de material, de modo que o espaço pode apresentar uma curvatura positiva ou negativa. Por exemplo, na Ref. [76], os autores investigaram a magnetização e a corrente persistente de férmions de Dirac sem massa confinados em um ponto quântico em uma camada de grafeno com disclinação. Na Ref. [77], podemos encontrar o estudo dos estados ligados em grafeno disclinados com impurezas de Coulomb na presença de um campo magnético uniforme. Na Ref. [78], os níveis de Landau em monocamadas de grafeno na presença de disclinação foram investigados. No caso da dislocação, o defeito está associado ao aparecimento da torsão.

Outro tema que abordamos nessa tese é a inclusão de efeitos não inerciais. Essa é uma questão de grande relevância em mecânica quântica [79, 80]. É bem conhecido que as interações eletromagnéticas e os efeitos inerciais podem exercer influências semelhantes em sistemas físicos. Desde o importante trabalho apresentado por Aharonov e Bohm [9], outras variações desse problema de interferência quântica foram propostas [81]. Na [82], também podemos encontrar o análogo gravitacional do efeito AB. No contexto da rotação, também há um problema de interferência análogo do efeito AB, conhecido na literatura como efeito Aharonov-Carmi (AC) [83, 84]. Para descrever a ideia do efeito AC, vamos supor que uma partícula esteja confinada em um anel girando, sob a ação de uma força inercial. Em princípio, é possível aplicar campos elétrico e magnético de forma que os efeitos inerciais e os efeitos eletromagnéticos cancelem-se. Dessa maneira, a partícula não

sentirá os efeitos de força alguma. Contudo, uma fase quântica surge em um experimento de interferência realizado sob essas condições [85]. Além disso, é possível investigar como o efeito AC modifica os estados eletrônicos, como no caso das moléculas C_{60} [86].

No contexto da matéria condensada, há também investigações revelando a similaridade entre forças inerciais e campos eletromagnéticos. É o caso, por exemplo, do efeito Barnett, o qual consiste em obter a magnetização proveniente da rotação de uma amostra [87, 88, 89]. Na Ref. [90], Vignale e Mashhoon mostram que a corrente persistente ocorre em anéis mesoscópicos colocados em rotação, mesmo na ausência de um campo magnético, enquanto que Rojo e Merlin [91] discutem o momento magnético de anéis e cilindros mesoscópicos girando. A conexão entre forças inerciais e um outro importante fenômeno da matéria condensada, o efeito Hall, é também abordada, por exemplo, nas Refs. [92, 93, 94].

Os nanotubos feitos de carbono, um material que tem atraído bastante atenção nos últimos anos, também são objetos de estudos quando colocados em rotação. De fato, entre as diversas aplicações, eles podem ser usados como partes de dispositivos mecânicos em nanoescala, como o eixo de nanomotores [95, 96, 97]. Na Ref. [98], Král e Sadeghpour, mostram a possibilidade de girar nanotubos. Os autores mostram que a rotação adquirida pelo nanotubo é induzida por um feixe de luz circularmente polarizado, o qual transfere o momento angular dos fótons para os fónons do nanotubo e, por espalhamento, passa para o corpo do nanotubo. Outras referências têm analisado o efeito da rotação em nanoestruturas, como por exemplo as Ref. [99, 100].

A estrutura dessa Tese é organizada como segue. No Capítulo 2, revisamos alguns potenciais que descrevem anéis e pontos quânticos, com ênfase no modelo de potencial radial proposto por Tan e Inkson, o qual fazemos a apresentação das principais propriedades do modelo. Em seguida, no Capítulo 3, revisamos a equação de Schrödinger de um elétron imerso em uma região de campos elétrico e magnético externos. Abordamos a escolha do calibre necessário para descrever o campo eletromagnético e, em seguida, fazemos alguns comentários sobre o fluxo magnético de AB e o calibre simétrico. Nesse ponto, aproveitamos a ocasião para tratar da corrente persistente, visto que esse fenômeno físico foi primeiramente relacionado com um dispositivo da matéria condensada a partir do fluxo magnético de AB.

Continuando com a revisão de alguns tópicos importantes para o restante do trabalho, no Capítulo 4, abordamos a descrição de uma partícula carregada vinculada a se mover em uma superfície curva e sujeita a campos elétrico e magnético externos. Seguimos os resultados apresentados por Ferrari e Cuoghi [56], os quais generalizaram o procedimento de quantização de *camada fina* derivado por da Costa [49] para incluir os efeitos de campos eletromagnéticos externos. Especificamente, nos dois capítulos seguintes, focamos no movimento de uma partícula limitada a uma superfície cônica. Desse modo,

apresentamos algumas características dessa superfície, como por exemplo, a métrica. A escolha pela superfície cônica advém da geometria não trivial mais simples, a qual é plana em toda parte exceto no ápice do cone [101]. A análise experimental de semicondutores com geometria cônica pode ser encontrada na Ref. [102], onde os autores relataram o crescimento de nanocones de Si e Ge, com o controle do ângulo do ápice. Na Ref. [103], um novo método de laser foi preparado para a formação de nanocones na superfície de semicondutores elementares Si e Ge e soluções sólidas de semicondutor $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ e $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Esses relatórios experimentais servem de paradigma para a análise teórica do comportamento eletrônico nesses dispositivos curvos.

No Capítulo 5, motivados pelo procedimento de quantização de *camada fina* descrito no capítulo anterior, investigamos as implicações físicas causada pela curvatura em um anel de dimensões mesoscópicas imerso em uma superfície cônica, a qual está embutida no espaço 3D Euclidiano. Adicionamos ao sistema uma combinação de um campo magnético confinado em um fino solenoide, o qual atravessa o centro do anel e resulta no fluxo magnético de AB, e de um campo magnético uniforme atuando na direção-z. Usamos o potencial radial proposto por Tan e Inkson, abordado no Capítulo 2, para modelar o anel isolado de largura finita na superfície curva. Obtemos o espectro de energia, a energia de Fermi, a magnetização e a corrente persistente. Discutimos em detalhes o efeito da curvatura sobre cada uma dessas propriedades. Além disso, verificamos como a temperatura afeta a corrente persistente e a magnetização. Os resultados obtidos no Capítulo 5 deram origem à dois artigos, intitulados “Effects of curvature on the electronic states of a two-dimensional mesoscopic ring” [104] e “Study of electronic properties, magnetization and persistent currents in a mesoscopic ring by controlled curvature” [105].

No Capítulo 6, abordamos os efeitos da curvatura de uma superfície cônica em um ponto quântico. Usamos novamente o procedimento de quantização de *camada fina*, uma vez que o modelo é desenhado em uma superfície curva. Para descrever o confinamento do gás de elétrons em um ponto quântico, usamos um particular limite do potencial radial usado para descrever o anel do Capítulo 5. Assim como no caso do anel, obtemos o espectro de energia de um elétron em um ponto quântico e, conseqüentemente, a energia de Fermi, a magnetização e a corrente persistente. Há uma vasta literatura sobre o espectro de pontos quânticos em amostras planas, algumas das quais são listadas no decorrer do Capítulo 6. Do ponto vista da corrente persistente e magnetização em ponto quânticos, coube a Tan e Inkson [20] um estudo completo dessas propriedades em um grande intervalo de campos magnéticos. A nossa contribuição consiste em estender esses resultados para o caso de um ponto quântico imerso em uma amostra curva. Nesse modelo não abordamos o efeito da temperatura no sistema. Os resultados obtidos no Capítulo 6 deram origem ao artigo intitulado “Modifications of Electron States, Magnetization, and Persistent Current in a Quantum Dot by Controlled Curvature” [106].

Devemos ressaltar que outros desenvolvimentos envolvendo confinamentos quânticos foram abordados. Por exemplo, um estudo recente sobre os efeitos geométricos induzidos por dois tipos de confinamento de partículas em uma superfície curva foi apresentado na Ref. [107]. Nesse trabalho, nos Capítulos 5 e 6, estudamos um diferente sistema. Iniciamos nossa abordagem considerando o potencial radial apresentado pela primeira vez na Ref. [20]. Após isso, analisamos os casos particulares de anéis e pontos quânticos. Uma vez que estamos considerando uma geometria cônica, o Hamiltoniano do sistema inclui um potencial induzido pela curvatura. Notamos que no Hamiltoniano da Ref. [107], além do conhecido potencial induzido pela curvatura, um potencial geométrico adicional está presente devido à torção.

A partir do Capítulo 7, iniciamos as análises dos efeitos de forças inerciais em anéis quânticos. Primeiramente, revisamos algumas considerações sobre a similaridade entre as forças inercial e de Lorentz e, em seguida, apresentamos a equação de Schrödinger no referencial girante. A correção devido à rotação na equação de Schrödinger pode ser vista como um acoplamento de um campo que produz a força inercial, semelhante ao que ocorre no caso do acoplamento eletromagnético. Usando esses resultados, propomos o estudo dos efeitos da rotação em anéis 1D. O modelo de anel unidimensional é obtido fazendo a coordenada r constante, ou seja, $r = r_0$, onde r_0 é o raio do anel 1D. Obtemos o espectro de energia corrigido pela rotação e a partir desse resultado, analisamos a magnetização e a corrente persistente. Consideramos, além disso, o efeito de temperaturas não nulas nas propriedades físicas do anel 1D. Os resultados do Capítulo 7 deram origem ao artigo intitulado “A toy model describing noninertial effects on electronic states, persistent current and magnetization of a 1D quantum ring” [108].

No Capítulo 8, continuamos abordando os efeitos da rotação, contudo, em um contexto mais geral do que é analisado no Capítulo 7. A nossa proposta é estudar os efeitos da rotação em um anel de dimensões finitas. Para modelar o anel bidimensional, usamos o potencial do tipo forte confinamento, e não mais o modelo de potencial radial proposto por Tan e Inkson. Especificamente, o modelo que usamos para descrever o anel foi usado por Halperin [109] e MacDonald [110] para analisar o efeito Hall em anéis. O potencial de forte confinamento permite que os estados do anel tenham características diferentes dependendo da posição que ocupam dentro do anel. De fato, se os estados se encontram no interior do anel, os estados são descritos pelos níveis de Landau. Caso os estados estejam nos limites do anel, os estados são definidos como estados de borda. Esse fator é crucial para que um determinado estado transporte corrente. Contudo, como veremos, esse modelo não permite uma análise muito profunda de propriedades físicas de anéis, como a corrente persistente. Essa limitação decorre da maneira como o espectro é obtido. As idéias desse Capítulo ainda encontram-se sobre análise.

Por fim, destacamos que nesta Tese todos os sistemas analisados consistem de

elétrons não interagentes. Deve ser notado que a interação elétron-elétron tem consequências importantes nas propriedades de anéis e pontos quânticos. Por exemplo, Maksym and Chakraborty estudaram o efeito dessa interação no espectro e mostraram que as propriedades termodinâmicas são sensíveis à interação [27, 111]. Na Ref. [112], baseado na aproximação de Hartree e considerando um ponto quântico não circular, os autores também mostraram que a magnetização é sensível à interação elétron-elétron. Na Ref. [113], a interação Coulombiana entre elétrons é tratada nas aproximações de Hartree e de Hartree-Fock. Aldea e et. al. [114], usaram o modelo de forte ligação (*tight-binding model*) para calcular a magnetização orbital de pontos quânticos simples e duplos acoplados por interações de Coulomb e por tunelamento de elétrons. Mais recentemente, foi reportado que pontos quânticos anisotrópicos com elétrons interagentes na presença de interação spin-órbita de Rashba exibindo um forte efeito sobre a magnetização [115]. Nesse trabalho, contudo, nós focamos nossa análise nos efeitos da curvatura e da rotação, evitando o efeito da interação elétron-elétron.

2 Potenciais de confinamento

Sistemas mesoscópicos há muito tempo vêm atraindo a atenção de físicos teóricos e experimentais devido a praticidade em revelar muitos fenômenos físicos quando submetidos a campos eletromagnéticos externos. Entre esses fenômenos, podemos citar o efeito Hall quântico [109], o efeito AB [9] e as correntes persistentes [29, 28, 116, 30]. Como já mencionamos antes, a geometria tem um papel muito importante na descrição de modelos físicos [117, 14, 19, 20]. A proposta deste Capítulo é revisar alguns potenciais, em especial o potencial radial proposto por Tan e Inkson [19], os quais descrevem anéis e pontos quânticos.

Podemos definir um anel mesoscópico a partir de um potencial de confinamento forte

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{se } r_- \leq r \leq r_+ \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde r_- e r_+ são os raios interno e externo do anel, respectivamente. Esse modelo de potencial nada mais é do que o potencial de um poço infinito. Para este modelo, os autovalores de energia podem ser encontrados numericamente impondo que a função de onda se anule fora do intervalo definido pelos raios do anel, ou seja, na região onde $r_- \leq r \leq r_+$. Os estados de energia têm características diferentes dependendo da posição radial que eles ocupam dentro do anel. De fato, os estados que ocupam as posições afastadas das bordas, ou seja, mais ao centro, comportam-se como estados de Landau. Por outro lado, próximos às fronteiras, devemos levar em conta o potencial de confinamento pela condição $\psi(r_-) = \psi(r_+) = 0$, o qual muda drasticamente o comportamento dos estados [110]. Por exemplo, os estados do interior do anel são degenerados, enquanto que os estados das bordas são não degenerados. Fazendo $r_- = 0$, então o potencial de confinamento forte, dado pela Eq. (2.1), descreve um ponto quântico 2D de raio $R = r_+$.

Na Ref. [18], Chakraborty e Pietiläinen consideraram o potencial parabólico

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (r - r_0)^2, \quad (2.2)$$

onde μ é a massa efetiva. Podemos ver que esse potencial corresponde a um potencial de um oscilador harmônico deslocado da origem com centro localizado em r_0 e de frequência ω_0 . Esse potencial resulta em um modelo de anel de raio médio r_0 . As energias desse modelo também foram encontradas numericamente. Se $r_0 = 0$, então recuperamos o potencial do oscilador usual e o sistema mesoscópico configura um ponto quântico¹.

¹ Nesse caso, o sistema tem soluções analíticas.

Um outro modelo de potencial, bastante utilizado na literatura, foi proposto por Tan e Inkson [14]. Esse potencial radial, o qual descreve um anel localizado, é dado por

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.3)$$

onde a_1 e a_2 são constantes e $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$. A grande vantagem desse modelo em relação ao potencial parabólico, dado pela Eq. (2.2), é que as autofunções e o espectro de energia são obtidos analiticamente. O primeiro termo da Eq. (2.3) representa um potencial tipo antiponto, o qual impede que o elétron acesse a região $r \neq 0$, enquanto que o segundo termo representa um potencial do tipo oscilador harmônico, responsável por confinar o elétron em uma região finita do espaço [118]. O potencial radial (2.3) tem o mínimo em r_0 , isto é, $V(r_0) = 0$, onde r_0 é o raio médio do anel definido por ²

$$r_0 = \left(\frac{a_1}{a_2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.4)$$

Um importante conceito em Física da Matéria Condensada é a energia de Fermi [119], definida como sendo a energia do nível mais alto ocupado no estado fundamental de um sistema de N elétrons, onde o estado fundamental é caracterizado como o estado de N elétrons à temperatura de zero absoluto [4]. A partir da energia de Fermi, podemos analisar as propriedades físicas de um determinado sistema, uma vez que ela especifica o número de estados eletrônicos ocupados. Para um sistema não interagente, a energia de Fermi é computada de forma autoconsistente³ usando a relação

$$N = \sum_i \theta(E_F - E_i), \quad (2.5)$$

onde E_i é a energia de um estado do sistema, E_F é a energia de Fermi e θ é a função degrau [119]. Aproveitamos o momento para comentar o caso em que a temperatura é não nula. Nessa situação o número de elétrons é obtido da relação [1, 4, 8, 120]

$$N = \sum_i f(E_i), \quad (2.6)$$

onde $f(E_i)$ é a função de Fermi-Dirac, dada por

$$f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1}, \quad (2.7)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura e μ é o potencial químico, o qual depende da temperatura. A condição de que N deve ser independente de T implica que μ

² O raio médio definido na Eq. (2.4) não corresponde, necessariamente, à média aritmética dos raios interno e externo do anel. Contudo, essa é a terminologia usada na literatura, a qual é mantida neste trabalho.

³ Ou seja, dado o número de elétrons N , qual a energia de Fermi do sistema? Para descobrir, chutamos um valor inicial para E_F e fazemos a soma em (2.5). Se o número de elétrons N , então essa é a energia de Fermi do sistema, caso contrário devemos dar um outro valor para a energia de Fermi. O processo se repete até que o número de elétrons seja o exigido.

deve diminuir com o aumento de T . Para $T \rightarrow 0$, $\mu = E_F$ e a Eq. (2.6) assume a forma dada pela Eq. (2.5). Para $T \neq 0$, temos $f(\mu) = 1/2$.

A largura do anel simulado pelo potencial radial, dado pela Eq. (2.3), pode ser calculada considerando que $V(r) = E_F$. Dessa forma, temos

$$r_{\pm} = \left(\frac{E_F + V_0 \pm \sqrt{E_F^2 + 2V_0 E_F}}{2a_2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.8)$$

Esse resultado mostra que, a priori, o modelo não tem simetria em relação ao raio médio r_0 . Contudo, a simetria pode ocorrer ajustando os valores dos parâmetros a_1 e a_2 , assim como a energia de Fermi. A partir os valores r_{\pm} , podemos calcular a largura do anel $\Delta r = r_+ - r_-$ em uma dada energia de Fermi.

Para r muito próximo de r_0 , o potencial radial (Eq. (2.3)) assume a forma parabólica (Eq. (2.2))

$$V(r \rightarrow r_0) \approx \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (r - r_0)^2. \quad (2.9)$$

A frequência ω_0 , que caracteriza a intensidade do confinamento transversal, é dada em termos dos parâmetros do potencial radial (Eq. 2.3) por

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}. \quad (2.10)$$

Fazendo a correspondência com o modelo clássico de um partícula presa a uma mola, notamos que o parâmetro a_2 corresponde à constante elástica k da mola. Para a aproximação parabólica, dada pela Eq. (2.9), a largura do anel é dada por

$$\Delta r = r_+ - r_- = \sqrt{\frac{8E_F}{\mu\omega_0^2}}. \quad (2.11)$$

Além da aproximação parabólica (Eq. 2.9), o potencial radial pode descrever outras estruturas mesoscópicas a partir de certos limites. Para $r_0 = \text{constante}$ e $\omega_0 \rightarrow \infty$, o sistema se aproxima do caso idealizado de um anel 1D de raio r_0 . Se $\omega_0 = \text{constante}$ e $r_0 \rightarrow \infty$, atingimos a situação de um faixa quântica 2D. Outros dois casos são obtidos simplesmente fazendo um dos parâmetros, a_1 ou a_2 , igual a zero. A saber, para $a_2 = 0$, obtemos um antiponto quântico. Fazendo $a_1 = 0$, o modelo descreve um ponto quântico. Explicitamente, temos $V(r) = a_2 r^2$ ou, escrito em termos de ω_0 ,

$$V(r) = \frac{\mu\omega_0^2}{8} r^2, \quad (2.12)$$

que é um potencial do tipo oscilador harmônico. Note a presença do fator 1/4 com relação ao valor dado pela Eq. (2.2) para o caso em que $r_0 = 0$. O raio do ponto quântico é calculado com a condição de que em $r = R$ (constante) tenhamos $V(R) = E_F$. Dessa forma, obtemos

$$R = \sqrt{\frac{8E_F}{\mu\omega_0^2}}. \quad (2.13)$$

Observe a semelhança entre esse resultado e o encontrado na Eq. (2.11). De fato, poderíamos ter encontrado esse resultado fazendo $r_+ = R$ e $r_- = 0$ na Eq. (2.11), pois o modelo parabólico é um potencial tipo oscilador harmônico deslocado da origem. O modelo de um ponto quântico foi primeiramente analisado em 1928 por Fock [121] e, mais tarde, em 1952 por Dingle [122]. É interessante ressaltar que Landau usou os resultados de Fock dois anos depois considerando o confinamento igual a zero [123]. Hoje, temos várias terminologias associadas ao nome de Landau, como por exemplo os “níveis de Landau”, a “degenerescência de Landau”, enquanto que Fock não teve o mesmo merecido reconhecimento.

Até o momento, analisamos as propriedades físicas de alguns potenciais de confinamento, os quais servem para descrever sistemas físicos. Contudo, em nenhuma situação, especificamos as dimensões reais dos anéis ou pontos quânticos, ou seja, não há nada que os caracterize como mesoscópicos. Para que um sistema seja considerado mesoscópico as dimensões devem permanecer dentro de um intervalo que varia de aproximadamente 1 nm a 1 μm . Contudo, podemos encontrar situações em que o tamanho do sistema esteja fora desse intervalo e, mesmo assim, o sistema ainda ser caracterizado como mesoscópico. Esse é o caso de um anel com um diâmetro de 5 μm e uma largura de 300 nm. O diâmetro do anel está fora do intervalo definido acima, mas esse sistema é ainda mesoscópico [124].

3 Equação de Schrödinger

Neste Capítulo, revisamos a equação de Schrödinger que descreve o comportamento de partículas quânticas não relativísticas imersas em um campo eletromagnético. Em seguida comentamos sobre o calibre necessário para descrever um campo eletromagnético. Por fim, exploramos o campo de AB e o calibre simétrico. A abordagem que fazemos sobre esse assunto já é conhecida na literatura. Começamos o estudo de um ponto de vista clássico, a partir do qual obtemos os resultados e as equações no cenário quântico.

Na física clássica, o movimento de um elétron¹ de carga $q = e$ em uma região onde existem campos eletromagnéticos é descrito pela força de Lorentz, dada por

$$\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (3.1)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade do elétron e $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ são os campos elétrico e magnético, respectivamente. Esses campos não são independentes uma vez que eles satisfazem às equações de Maxwell. Além disso, podemos especificar os campos elétrico e magnético em termos de potenciais

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (3.2b)$$

onde $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$ é o potencial escalar e $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ é o potencial vetor. Veremos adiante que esses potenciais não são determinados unicamente, isto é, dados os potenciais $\phi(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ é possível determinar outros conjuntos de potenciais $\phi'(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)$ capazes de descrever o mesmo campo eletromagnético [125].

Substituindo a descrição dos campos em termos de potenciais (Eq. (3.2)) na Eq. (3.1), obtemos a força

$$\mathbf{F} = -\nabla U + \frac{d}{dt}(\nabla_{\mathbf{v}}U), \quad (3.3)$$

onde temos definido o potencial generalizado

$$U = e\phi - e\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}. \quad (3.4)$$

Esse resultado é uma característica de movimentos de partículas carregadas em campos eletromagnéticos. A força generalizada é mais geral do que o conjunto de forças conservativas (potenciais independentes do tempo e da velocidade) [126]. A Lagrangeana desse sistema

¹ Na verdade, o elétron tem carga $q = -e$, onde $e > 0$. Contudo, vamos assumir que $e < 0$, de modo que $q = e$. O uso implícito do sinal negativo não altera os resultados físicos.

pode ser obtida facilmente, sendo dada por $\mathcal{L} = T - U$, onde T é a energia cinética e U é o potencial generalizado dado pela Eq. (3.4). Ela é escrita como

$$\mathcal{L} = \frac{\mu_e \mathbf{v}^2}{2} - e\phi + e\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}, \quad (3.5)$$

onde μ_e é a massa do elétron. Consequentemente, também podemos encontrar o Hamiltoniano de um elétron sujeito a campos eletromagnéticos, $H = \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - \mathcal{L}$, onde \mathbf{p} é o momento canônico, dado por $\mathbf{p} = \pi + e\mathbf{A}$, o qual não deve ser confundido com o momento mecânico (ou momento cinético) $\pi = \mu_e \mathbf{v}$. Usando a Lagrangeana acima, o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi. \quad (3.6)$$

No formalismo Lagrangeano, as variáveis dinâmicas fundamentais são a posição \mathbf{r} e a velocidade \mathbf{v} , enquanto que no formalismo Hamiltoniano, as variáveis dinâmicas fundamentais são a posição \mathbf{r} e o momento canônico \mathbf{p} .

Na mecânica quântica, as variáveis dinâmicas e, conseqüentemente, todas as funções que dependem delas, são alçadas à categoria de operadores, isto é, fazendo as mudanças $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}$ e $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P}$. Dessa forma, podemos reescrever o Hamiltoniano (3.6) no formalismo quântico como

$$H = \frac{1}{2\mu} [\mathbf{P} - e\mathbf{A}(\mathbf{R},t)]^2 + e\phi(\mathbf{R},t). \quad (3.7)$$

Em nosso estudo, os potenciais escalar e vetor não dependem explicitamente do tempo. Dessa forma, a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + e\phi(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

Essa equação descreve o movimento quântico não relativístico de um elétron de massa μ_e e carga $q = e$ em um campo eletromagnético.

3.1 O problema do calibre

Quando um conjunto de potenciais é escolhido para descrever um campo eletromagnético, dizemos que uma escolha do calibre foi feita. Como mencionado acima, os potenciais escalar e vetor não são determinados unicamente. Isso significa dizer que diferentes calibres podem ser usados para descrever o mesmo campo eletromagnético. Na Eq. (3.2), consideramos os campos elétrico e magnético, \mathbf{E} e \mathbf{B} , descritos pelos potenciais ϕ e \mathbf{A} , respectivamente, isto é, o calibre \mathcal{G} . Agora, vamos considerar um outro calibre, \mathcal{G}' , descrito pelos potenciais ϕ' e \mathbf{A}' que resultam nos campos \mathbf{E}' e \mathbf{B}' . Se a lei de transformação entre \mathcal{G}' e \mathcal{G} for dada por

$$\phi'(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r},t) - \frac{\partial \chi(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \quad (3.9a)$$

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t), \quad (3.9b)$$

então $\mathbf{E}' = \mathbf{E}$ e $\mathbf{B}' = \mathbf{B}$. A lei de transformação acima é definida como uma transformação de calibre e, assim, os campos elétrico e magnético são invariantes por uma transformação de calibre [125]. A função $\chi(\mathbf{r}, t)$ é uma função escalar arbitrária. Esse resultado mostra que a equação de movimento de Newton (Eq. (3.1)) e, conseqüentemente, a posição e a velocidade da partícula, não dependem do calibre escolhido.

A partir das definições dadas pela Eq. (3.9), podemos mostrar que as variáveis fundamentais do formalismo Hamiltoniano na mecânica clássica são transformadas como

$$\mathbf{r}_{\mathcal{G}'}(t) = \mathbf{r}_{\mathcal{G}}(t), \quad (3.10a)$$

$$\mathbf{p}_{\mathcal{G}'}(t) = \mathbf{p}_{\mathcal{G}}(t) + q\nabla\chi(\mathbf{r}(t), t). \quad (3.10b)$$

Note que, enquanto $\mathbf{r}(t)$ independe do calibre, o momento canônico $\mathbf{p}(t)$ não é uma grandeza invariante por transformação de calibre. Seu valor numérico depende do calibre particular a ser adotado para descrever o campo eletromagnético. Na Mecânica Quântica, consideramos que os valores esperados de um operador se comportam, sob uma transformação de calibre, de maneira similar às grandezas clássicas [127]. Considerando $|\psi\rangle$ o ket de estado no calibre \mathcal{G} e $|\psi'\rangle$ o ket de estado no calibre \mathcal{G}' , então, o análogo das transformações da variáveis do formalismo Hamiltoniano clássico (Eq. (3.10)) são dadas por

$$\langle\psi'|\mathbf{R}_{\mathcal{G}'}|\psi'\rangle = \langle\psi|\mathbf{R}_{\mathcal{G}}|\psi\rangle, \quad (3.11a)$$

$$\langle\psi'|\mathbf{P}_{\mathcal{G}'}|\psi'\rangle = \langle\psi|[\mathbf{P}_{\mathcal{G}}(t) + q\nabla\chi(\mathbf{R}, t)]|\psi\rangle. \quad (3.11b)$$

Obviamente, a norma do ket deve ser preservada, isto é, $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$. Isso implica no operador de transformação unitária T_{χ} que transforma o ket $|\psi\rangle$ no ket $|\psi'\rangle$,

$$T_{\chi} = e^{i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{R}, t)}. \quad (3.12)$$

Com isso, na representação da posição, a função de onda obedece à lei de transformação

$$\psi'(\mathbf{r}) = e^{i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{r}, t)}\psi(\mathbf{r}). \quad (3.13)$$

Desse modo, dizemos que, para a função de onda, uma transformação de calibre corresponde a uma invariância de fase local, isto é, uma transformação que depende das coordenadas do espaço-tempo. Essa situação é extremamente importante, uma vez que efeitos físicos são propagados localmente de um ponto a outro [128].

Podemos analisar os resultados acima de um outro ponto de vista. Para isso, vamos considerar a seguinte transformação de fase global:

$$\psi'(\mathbf{r}) = e^{i\alpha}\psi(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

onde α é uma constante. Nesse caso, a equação de Schrödinger de uma partícula livre (com $\mathbf{A} = \phi = 0$ na Eq. (3.8)) é invariante sob essa transformação. Por outro lado, para uma transformação de fase local, com $\alpha = \alpha(\mathbf{r}, t)$, a equação de onda livre não é mais invariante. Para manter a invariância, a equação de onda livre deve ser modificada. Contudo, essa nova equação não descreve mais uma partícula livre. A nova equação transformada descreve uma partícula movendo-se em algum campo de força [128]. Como descrito acima, para o caso de um elétron, esse campo de força é justamente o campo eletromagnético. Em resumo, ao se propor uma teoria que seja invariante por uma transformação de fase local, teremos uma teoria de partículas interagindo com campos [128].

3.2 O campo de AB: O fluxo central

Vamos considerar um solenoide de raio R_S e de comprimento muito grande, de modo que os efeitos das bordas sejam desprezíveis. Ligando o solenoide a uma bateria, uma corrente elétrica i é gerada. Quando essa corrente passa pelas espiras, um campo magnético uniforme é produzido dentro do solenoide. Fora dele, não há campo magnético. Essa configuração é representada por

$$\mathbf{B} = \begin{cases} n\mu_0 i \hat{\mathbf{z}}, & \text{se } r < R_S \\ 0, & \text{se } r > R_S \end{cases}, \quad (3.15)$$

onde n representa o número de espiras. Diferente do campo magnético, o potencial vetor tem componente não nula dentro e fora do solenoide,

$$A_\varphi = \begin{cases} Br/2, & \text{se } r < R_S \\ BR_S^2/2r, & \text{se } r \geq R_S \end{cases}. \quad (3.16)$$

Classicamente, um elétron orbitando na região exterior ao solenoide não sente efeitos do campo magnético. De fato, a força de Lorentz é nula nessa região, pois $\mathbf{B} = 0$. Observe que a força de Lorentz não faz nenhuma menção ao potencial vetor [5], o qual é não nulo na região onde o elétron orbita.

Na Mecânica Quântica, o elétron interage com o campo magnético via potencial vetor, de modo que a função de onda adquire uma fase. Para vermos isso, vamos considerar a equação de Schrödinger dada pela Eq. (3.8) e assumir que o potencial escalar é nulo. Além disso, também assumimos que o elétron é restrito a se mover em um círculo de raio r_0 (com $r_0 > R_S$) [5], isto é, ele executa um caminho circular de raio constante na região livre de campos magnéticos. Nesse caso, a equação de Schrödinger que descreve o movimento é

$$\frac{1}{2\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.17)$$

O potencial vetor na região de interesse é dado por (veja a Eq. (3.16))

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\varphi}, \quad (3.18)$$

onde $\Phi = \pi R_S^2 B$ é o fluxo magnético. Nesse sentido, podemos adiantar que somente o fluxo vai modificar o estado do elétron. As autofunções do Hamiltoniano, as quais dependem somente do ângulo azimutal φ , são dadas por

$$\psi_m(\varphi) = C e^{i(m-l)\varphi}, \quad (3.19)$$

onde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, os quais são determinados pela condição de contorno $\psi_m(\varphi + 2\pi) = \psi_m(\varphi)$, $l = \Phi/\Phi_0$, com $\Phi_0 = h/e$ sendo o quantum de fluxo magnético e C uma constante a ser determinada. Usando (3.19) e fazendo $r = r_0$ na Eq. (3.17), obtemos os correspondentes autovalores de energia

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} (m - l)^2, \quad (3.20)$$

Na Fig. 1, plotamos as energias de um elétron em um anel 1D, dada pela Eq. (3.20), em função de l . Em (a), mostramos o comportamento dos estados $m = -1$, $m = 0$, $m = 1$ e $m = 2$ em função de l . Podemos observar que para $l = 0$, os estados com $m = -1$ e com $m = 1$ têm a mesma energia. De forma geral, os estados opostos são degenerados, exceto, obviamente o estado com $m = 0$. Uma pequena variação em l elimina a degenerescência. Contudo, a degenerescência retorna para valores específicos de l . Por exemplo, em $l = 1$, os estados com $m = 0$ e com $m = 2$ são degenerados. Em (b), mostramos o comportamento de alguns estados em um maior intervalo de l . Cada parábola corresponde a um estado de energia. A linha vermelha, a qual corresponde à energia de Fermi, ilustra o comportamento eletrônico em um anel 1D fechado com três elétrons em função de l^2 . Observamos que os elétrons tendem a ocupar os estados de energias mais baixas à medida que mudamos l . Um aumento no número de elétrons faz com que outros estados sejam acessados, contudo, o perfil da energia de Fermi continua a ser do tipo ilustrado na Fig. 1.

A velocidade de grupo é dada por [124]

$$v_g = \frac{r_0}{\hbar} \frac{\partial E_m}{\partial m}. \quad (3.21)$$

Para estados com $m - l > 0$ a velocidade de grupo é positiva, enquanto que para estados com $m - l < 0$ a velocidade de grupo é negativa. Em outras palavras, estados com $m - l > 0$ se propagam no sentido anti-horário e os estados com $m - l < 0$ se propagam no sentido horário. A velocidade de grupo é nula para o estado com $m - l = 0$.

Em particular, fazendo $l = 0$, o que corresponde a anular o fluxo magnético central na Eq. (3.18), então a equação de Schrödinger (Eq. (3.17)) descreve o movimento circular de uma partícula carregada livre³, cuja as autofunções são do tipo $e^{im\varphi}$. Então, isso sugere a seguinte formulação para a Eq. (3.19):

$$\psi_m(\varphi) = C e^{il\varphi} \chi_m(\varphi), \quad (3.22)$$

² Em $l = 0$, os elétrons ocupam os estados com $m = 0$, $m = -1$ e $m = 1$, os quais são os três estados de energias mais baixas nesse valor de l

³ Veja o Problema 2.46 da Ref. [5].

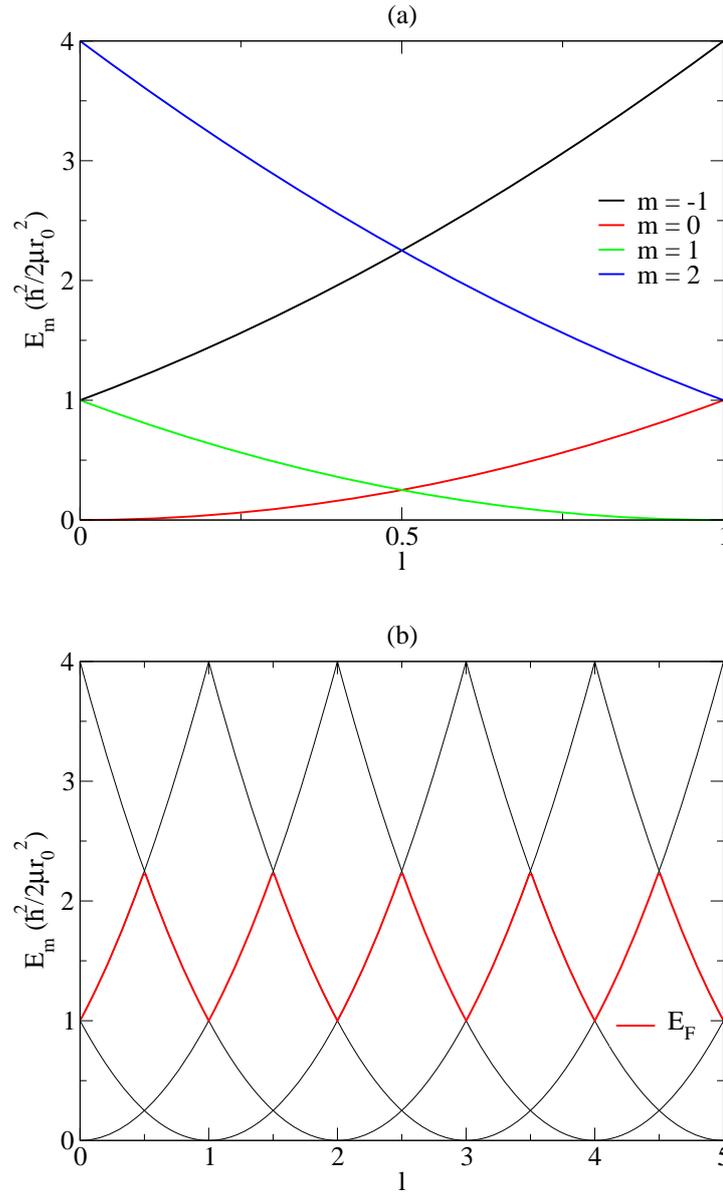


Figura 1 – Energia, dada pela Eq. (3.20), como uma função do parâmetro l . A energia é dada em unidade de $\hbar^2/2\mu r_0^2$. (a) Em as linhas preta, vermelha, verde e azul descrevem o comportamento dos estados $m = -1$, $m = 0$, $m = 1$ e $m = 2$, respectivamente. Em (b), a linha vermelha denota o comportamento da energia de Fermi para o caso de três elétrons. Podemos ver que os elétrons tendem a ocupar sempre os estados de energias menores à medida que aumentamos o valor de l

onde $\chi_m(\varphi)$ é a função de onda para o caso em que o fluxo central é nulo. O termo $e^{il\varphi}$ corresponde a uma fase. Esse resultado não é surpreendente. De fato, podemos resolver a equação de Schrödinger livre de campos e depois usar a Eq. (3.13) para obter a função de onda usando a configuração particular acima. Observe que, nesse caso, o calibre \mathcal{G} corresponde a situação em que não temos campo magnético, enquanto que o calibre \mathcal{G}' corresponde ao caso em que $A_\varphi = \Phi/(2\pi r)$. A função $\chi(\mathbf{r}, t)$ é calculada resolvendo a

Eq. (3.9b). Portanto, o potencial vetor pode ser eliminado da equação de Schrödinger via uma transformação de calibre [5, 18].

Na Física da Matéria Condensada o modelo descrito acima corresponde ao modelo idealizado de um anel 1D com um fluxo magnético atravessando a área interna do anel. Embora esse modelo seja limitado, uma vez que na prática não é possível atingir um anel de largura zero, podemos estudar alguns fenômenos físicos com essa configuração. Por exemplo, propriedades de transporte e correntes persistentes. Nessa tese, focamos no estudo das correntes persistentes e da magnetização. Por esta razão, nesse momento, é importante apresentar um estudo sobre essas correntes persistentes em anéis 1D.

3.2.1 Corrente persistente

O estudo inicial sobre a origem de correntes de equilíbrio em anéis foi realizada por Byers e Yang no trabalho intitulado *Theoretical Considerations Concerning Quantized Magnetic Flux in Superconducting Cylinders* [28]. Considerando uma estrutura simplesmente não conexa, a qual é atravessada por um fluxo magnético Φ , os autores foram capazes de mostrar que a condição de contorno é dependente do fluxo magnético, o que resulta na periodicidade dos níveis de energia. Consequentemente, a função partição Z também é uma função periódica do fluxo magnético Φ , com período $\phi_0 = h/e$. Com isso, a corrente persistente pode ser calculada como

$$I = \frac{\partial F}{\partial \Phi} = \frac{\partial (k_B T \ln Q)}{\partial \Phi}, \quad (3.23)$$

onde F é a energia livre, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura.

Após esse trabalho, passou-se alguns anos até que Büttiker, Imry and Landauer [29] relacionassem essa corrente a um dispositivo do estado sólido. O trabalho mostra a relação existente entre a função de onda de Bloch [4] e a função de onda de um elétron descrevendo uma órbita circular em um anel 1D com um fluxo magnético atravessando o centro da órbita.

Vamos considerar um anel isolado, o qual é atravessado por um fluxo magnético Φ (fluxo de AB). Sabemos da Física do Estado Sólido que um cristal perfeito é constituído por um arranjo de átomos organizados de forma periódica. Os elétrons mais fracamente ligados aos átomos formam os elétrons de condução, os quais se movem pelo cristal. Dessa forma, os átomos ficam carregados positivamente, formando os íons. Então, o movimento dos elétrons de condução no cristal não é livre, ou seja, em intervalos periódicos os elétrons sentem a presença de um potencial devido ao núcleo iônico. Para descrever o problema corretamente, somos assim levados a considerar o problema de um elétron em um potencial que leva em consideração a periodicidade da rede cristalina, ou seja, $U(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, onde \mathbf{a} é o vetor da rede [129]. Esse resultado leva a um aperfeiçoamento da teoria do elétron livre, o qual não considera o potencial dos núcleos iônicos. Embora o modelo de elétron livre

forneça bons resultados sobre as propriedades de elétrons nos sólidos, ele falha em outros aspectos, como por exemplo, a diferença entre isolantes e condutores [4].

O teorema de Bloch afirma que as soluções da equação de Schrödinger para um potencial periódico é o produto de uma onda plana por uma função periódica de período igual ao da rede cristalina [4]. Explicitamente, temos

$$\psi_{Bloch} = e^{ikx} u_k(x), \quad (3.24)$$

onde $u_k(x) = u_k(x + a)$ e a é o período da rede cristalina. Comparando esse resultado com o da Eq. (3.22), vemos que a função de onda de um elétron descrevendo uma órbita circular de comprimento L em torno de um fluxo de AB é uma função de Bloch. Em outras palavras, quando um elétron descreve um movimento em um anel, seu comportamento é o mesmo como se estivesse em uma estrutura periódica, cujo o período da rede cristalina é $a = L$ [29, 130, 131]. Veja que na Eq. (3.22), estamos considerando a variável angular, de modo que a função $\chi_m(\varphi)$ é periódica na coordenada φ , com período 2π . Dessa forma, podemos relacionar a dependência do vetor de onda de Bloch, que definimos como sendo k , com o fluxo Φ [29, 32].

Seja L o comprimento do anel. Então, a relação entre o vetor de onda de Bloch e o fluxo de AB é dada por

$$k_n = \frac{2\pi l}{L}, \quad (3.25)$$

onde $l = \Phi/\Phi_0$. A quantidade $2\pi/L$, na equação acima, corresponde à largura da zona de Brillouin da rede periódica [4]. Os limites da primeira zona de Brillouin de uma rede linear são $k = \pm\pi/L$, os quais, pela Eq. (3.25), correspondem ao caso em que $l = \pm 1/2$. O resultado expresso pela Eq. (3.25) implica que o espectro de energia e as demais quantidades relacionadas a ela são funções que dependem do fluxo magnético AB [116]. Assim, o estado n , cuja velocidade é dada por $v_n = (1/\hbar) (\partial E_n / \partial k_n)$, transporta uma densidade de corrente $j_n = -ev_n/L$. Usando a dependência de k_n com o fluxo magnético, obtemos a corrente transportada por um estado n que é periódica com o fluxo magnético, dada pela equação

$$I_n = -\frac{\partial E_n}{\partial \Phi}. \quad (3.26)$$

Essa é a mesma relação derivada por Byers e Yang [29]. Portanto, em um dispositivo mesoscópico com uma geometria anelar, uma corrente persistente resulta da sensibilidade do espectro de energia à condição de contorno, a qual é determinada pelo fluxo magnético de AB [117]. Devemos ressaltar que o aparecimento dessa corrente em dispositivos mesoscópicos está relacionado à conservação da fase da função de onda do elétron adquirida ao descrever um caminho ao redor do anel atravessado por um fluxo magnético [34, 116]. A corrente total é obtida somando a corrente transportada por cada estado ocupado, ou seja,

$$I = \sum_n I_n. \quad (3.27)$$

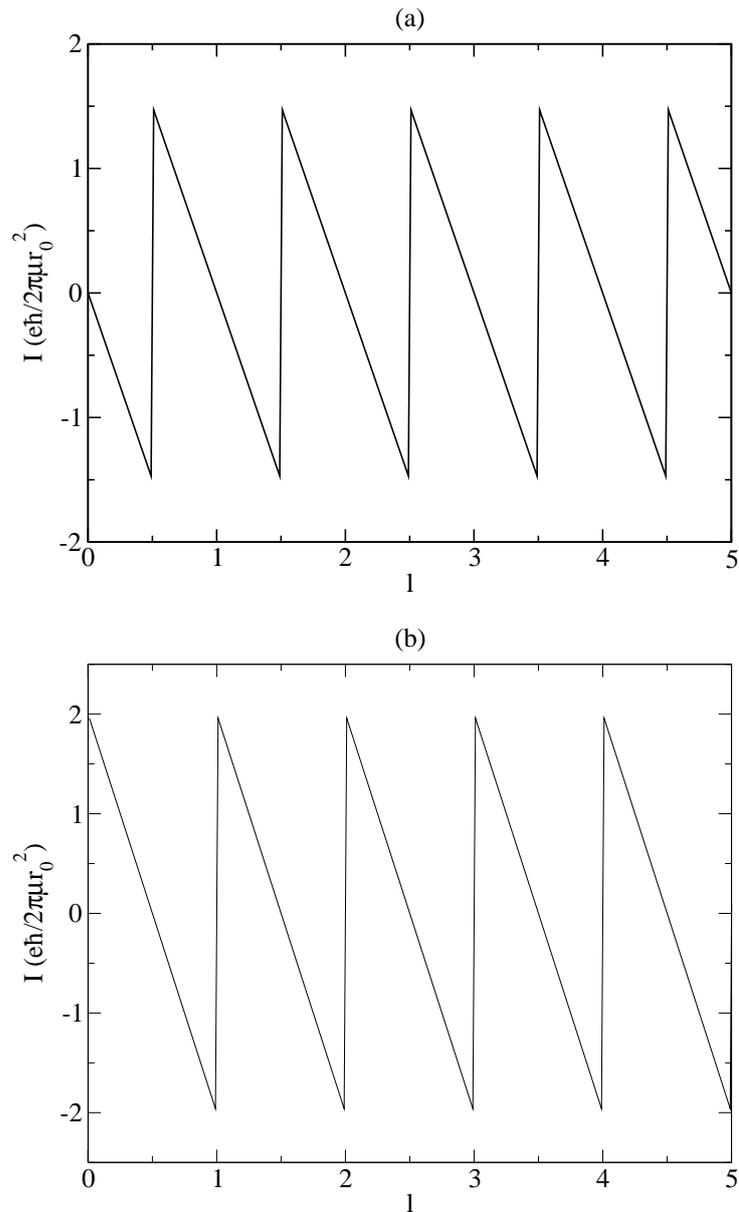


Figura 2 – O comportamento da corrente persistente, dada pela Eq. (3.27), em um anel 1D em função do parâmetro l . Em (a), consideramos o caso em que há três elétrons, enquanto que em (b) há quatro elétrons.

Para o caso de um anel 1D, a corrente transportada por um único estado é obtida substituindo (3.20) em (3.26). Explicitamente, temos

$$I_n = \frac{e\hbar}{2\pi\mu r_0^2} (m - l). \quad (3.28)$$

Na Fig. 2, mostramos o comportamento da corrente persistente em um anel 1D. Podemos observar que dependendo do número de elétrons, os máximos ocorrem para valores de fluxo diferentes. De fato, se o número de elétrons for ímpar, então a corrente é nula em $l = \dots - 1, 0, 1, \dots$. Note que $l = 0$ corresponde ao centro da primeira zona de

Brillouin [4, 131]. Por outro lado, se o número de elétrons for par, então a corrente é nula em $l = \dots, -1/2, 1/2, 3/2, \dots$. Note que os valores $l = \pm 1/2$ correspondem às bordas da primeira zona de Brillouin [4, 131]. Um maior número de elétrons aumenta a amplitude das oscilações, mas a localização dos máximos depende somente do número de elétrons ser ímpar ou par.

Como observado acima, o modelo de anel 1D é um modelo idealizado. Em experimentos reais, um anel tem uma largura finita. Além disso, não é o fluxo de AB que está presente nos experimentos, mas sim um campo magnético uniforme B . Esse campo magnético penetra na região condutora do anel, em outras palavras, o elétron interage diretamente com o campo magnético. Isso não ocorre quando usamos o campo de AB. De fato, não havendo campo na região externa do solenóide, o anel está sujeito somente ao fluxo de AB, o que leva a uma periodicidade das energias e, conseqüentemente, das propriedades físicas, como foi observado acima. Sendo assim, na próxima seção, apresentamos o estudo sobre o comportamento de um elétron quando imerso em um campo magnético uniforme. Para isso, usamos o calibre simétrico.

3.3 O calibre simétrico

Considere um elétron imerso em uma região onde existe um campo magnético uniforme. O campo magnético é perpendicular ao plano de movimento do elétron. Classicamente, sabemos que os elétrons são forçados a descrever órbitas circulares conhecidas como órbitas ciclotrônicas. Observe, aqui, a analogia com o movimento de elétrons em torno do núcleo atômico [1]. Na mecânica quântica a aplicação do campo magnético uniforme dá origem aos níveis de Landau que são infinitamente degenerados. Esses estados de Landau são estados localizados e os autoestados de energia aumentam linearmente com o campo magnético [132].

Vamos assumir, como é de praxe, que o campo magnético uniforme aponta na direção- z . Como sabemos, diferentes calibres podem descrever esse campo magnético. Contudo, há dois calibres que são muito abordados na literatura, a saber, os calibres de Landau e o simétrico. O calibre de Landau é dado por

$$\mathbf{A} = xB\hat{y}, \quad (3.29)$$

o qual é invariante por translação ao longo do eixo- y ⁴. Isso significa que os autoestados da componente y do operador momento \mathbf{P} são também autoestados do Hamiltoniano dado pela Eq. (3.7). A escolha desse calibre é conveniente quando estudamos geometrias retangulares,

⁴ O calibre de Landau pode ser escrito também como

$$\mathbf{A} = -yB\hat{x}. \quad (3.30)$$

Nesse caso, a invariância translacional ocorre ao longo do eixo- x .

como por exemplo, uma fita quântica 2D. Esse sistema é a base de um importante fenômeno mesoscópico, o efeito Hall quântico inteiro. Considere um filme quântico 2D, no qual passa uma corrente elétrica, colocado perpendicular a um campo magnético uniforme. As observações experimentais mostram que a resistência perpendicular à direção da corrente é quantizada. Esse é o efeito Hall quântico (a resistência é algumas vezes chamada de resistência Hall), o qual está diretamente relacionado ao comportamento dos estados eletrônicos à medida que o campo magnético aumenta. Esse importante fenômeno mesoscópico foi observado primeiramente por von Klitzing et. al. [133]. Além disso, observa-se que a resistência na direção paralela à corrente elétrica, ou seja, a resistência longitudinal, oscila em função do campo magnético. Essas oscilações são conhecidas como oscilações de Shubnikov–de Haas (SdH) e foram observadas primeiramente por Fowler et. al. [134]. O efeito Hall quântico e as oscilações SdH estão fortemente conectados. Entre as inúmeras referências sobre o efeito Hall e as oscilações de SdH, podemos listar as Refs. [135, 1, 124, 2].

Para geometrias circulares, o calibre simétrico é o mais conveniente⁵. Em coordenadas cartesianas ele é dado por

$$\mathbf{A} = -\frac{yB}{2}\hat{x} + \frac{xB}{2}\hat{y} \quad (3.31)$$

enquanto que, escrito em coordenadas cilíndricas, assume a forma

$$\mathbf{A} = \frac{Br}{2}\hat{\varphi}. \quad (3.32)$$

Esse calibre elimina a simetria translacional ao longo dos eixos x e y . Contudo, quando escrito em coordenadas cilíndricas (Eq. (3.32)) fica evidente a invariância por rotação, ou seja, os autoestados da componente- z do operador de momento angular são também autoestados do Hamiltoniano. Usando a Eq. (3.9b), podemos mostrar que os calibres de Landau e simétrico estão conectados pela função escalar [136]

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}xyB. \quad (3.33)$$

Comparando com os resultados expressos na Eq. (3.16), vemos que o potencial (3.32) configura a região interior de um solenóide percorrido por uma corrente elétrica i (veja a Sec. 3.2).

A equação de Schrödinger dada pela Eq. (3.8), escrita em coordenadas polares, torna-se

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i \frac{eB}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(\frac{eBr}{2\hbar} \right)^2 \right] \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.34)$$

Como o Hamiltoniano em (3.34) comuta com o operador de momento angular, $L_z = i\hbar\partial_\varphi$, então podemos usar o ansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{im\varphi} f_m(r), \quad (3.35)$$

⁵ Esse calibre é conveniente, por exemplo, para estudar o efeito Hall fracionário [136], descoberto por Tsui et. al. [137].

onde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Com isso, obtemos a equação radial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + V_{efe}(r) \right] \varphi(r) = E\varphi(r), \quad (3.36)$$

onde temos definido o potencial efetivo

$$V_{efe}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{r^2} + \frac{r^2}{4\lambda_B^4} - \kappa_B^2 \right), \quad (3.37)$$

onde

$$\kappa_B^2 = \frac{m}{\lambda_B^2}, \quad (3.38)$$

é um parâmetro adimensional,

$$\lambda_B = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_c}}, \quad (3.39)$$

é o comprimento magnético, e

$$\omega_c = \frac{eB}{\mu}, \quad (3.40)$$

é a frequência ciclôtrônica⁶. Usando o potencial efetivo (3.37), podemos determinar a localização radial dos estados

$$r_m = \sqrt{2|m|\lambda_B}. \quad (3.41)$$

Claramente, podemos ver que o comprimento magnético diminui com o aumento do

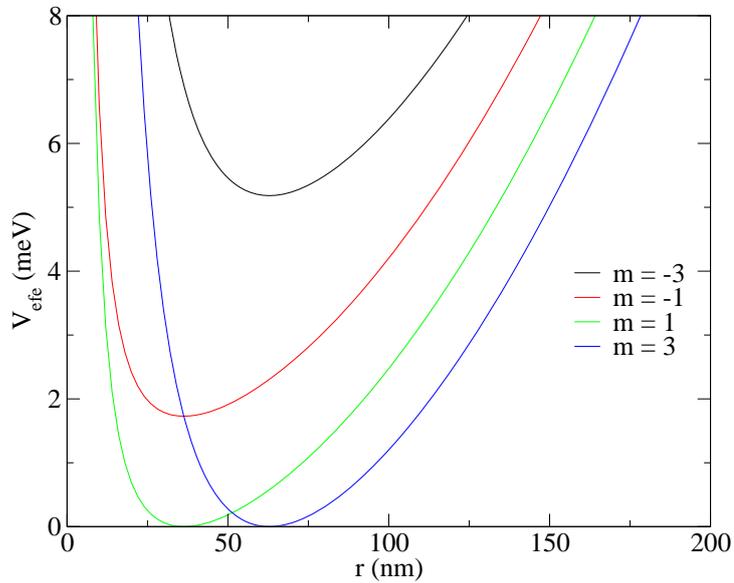


Figura 3 – O potencial efetivo, dado pela Eq. (3.37), de alguns estados em função da distância radial, quando o campo magnético é $B = 1.0$ Tesla. Podemos ver que os estados simétricos ocupam a mesma posição, mas a energia mínima é nula se $m \geq 0$ e não nula se $m < 0$.

⁶ Note que esse potencial efetivo tem a estrutura do potencial radial proposto por Tan e Inkson (veja Eq. (2.3)). De fato, a menos de uma constante, podemos fazer o mapeamento $a_1 \rightarrow m^2$ e $a_2 \rightarrow (4\lambda_B^4)^{-1}$.

campo magnético. Consequentemente, o aumento do campo magnético faz com que os estados ocupem posições radiais menores, isto é, o raio dos estados diminuem. Notamos também que os estados com $m > 0$ e com $m < 0$ ocupam a mesma posição radial (veja a Fig. 3). Contudo, a energia potencial mínima dos estados simétricos não é igual. De fato, substituindo r_m na Eq. (3.37), obtemos

$$V_{min} = \begin{cases} |m|\hbar\omega_c, & \text{se } m < 0 \\ 0, & \text{se } m \geq 0 \end{cases}, \quad (3.42)$$

Então, os estados com $m \geq 0$ têm potencial mínimo igual a zero, enquanto que os estados com $m < 0$ têm energia potencial mínima não nula. Nesse último caso, a energia potencial mínima é uma função linear crescente do número quântico m .

A solução geral da equação radial (3.36) é dada por

$$f_{n,m}(r) = \left(\frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4\lambda_B^2}} \left[c_1 M\left(\frac{1+|m|-\lambda_B^2\kappa_B'^2}{2}, 1+|m|, \frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right) + c_2 U\left(\frac{1+|m|-\lambda_B^2\kappa_B'^2}{2}, 1+|m|, \frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right) \right], \quad (3.43)$$

onde $M(a, c; x)$ e $U(a, c; x)$ são as funções hipergeométricas confluentes de tipo 1 e 2, respectivamente, e c_i (com $i = 1, 2$) são constantes. Também definimos uma nova constante adimensional $\kappa_B'^2 = \kappa_B^2 + 2\mu E/\hbar^2$. Podemos ver que a solução geral da Eq. (3.36) é uma combinação linear de funções regular e irregular, com a irregularidade ocorrendo em $r = 0$. Em mecânica quântica, devemos exigir que a função de onda seja de quadrado integrável. Uma das exigências para que isso ocorra é que ela tenha um comportamento assintótico finito em $r = 0$. A única função que satisfaz a esse critério é a $M(a, c; x)$. Portanto, podemos fazer $c_2 = 0$ e trabalhar apenas com a solução regular na origem. Dessa forma, escremos

$$f_{n,m}(r) = C_{n,m} \left(\frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4\lambda_B^2}} M\left(\frac{1+|m|-\lambda_B^2\kappa_B'^2}{2}, 1+|m|, \frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right), \quad (3.44)$$

onde temos feito $c_1 \rightarrow C_{n,m}$. Agora, para encontrar as energias, usamos a condição de que a função de onda deve ter um comportamento assintótico finito quando $r \rightarrow \infty$. Neste caso, devemos estudar o comportamento assintótico da função $M(a, c, x)$ na solução (3.44) nesse limite. Tal comportamento dado é por

$$M(a, c, x \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} x^{-a} e^{i\pi a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} x^{a-c} e^x, \quad (3.45)$$

onde $\Gamma(z)$ é a função gama. Note que o segundo termo da Eq. (3.45) tem um comportamento divergente. Para acessar uma solução que tenha um comportamento convergente quando $x \rightarrow \infty$, devemos impor que $a \leq 0$, isto é,

$$a = -n, \quad (3.46)$$

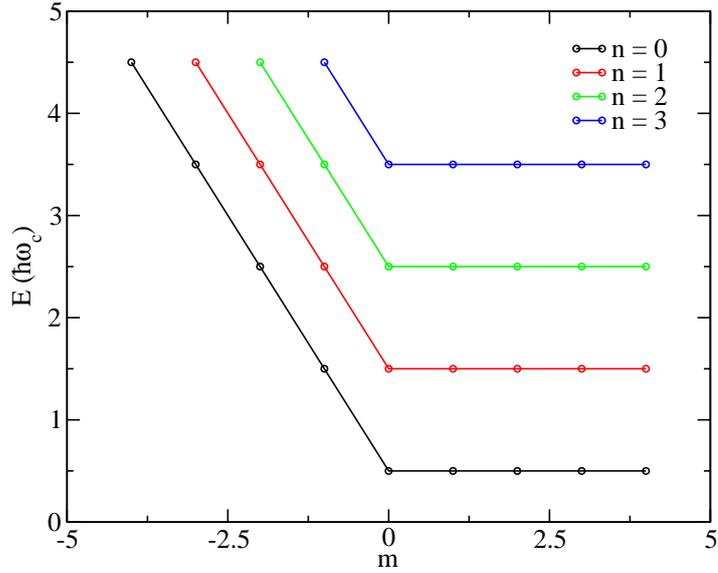


Figura 4 – Os 4 primeiros níveis de Landau em função do número quântico m para $B = 1.0$ Tesla. As energias são dadas pela Eq. (3.48). Os pontos representam os estados. Note que os estados com $m < 0$ degeneram em níveis diferentes.

onde n é um número inteiro não negativo. Assim, teremos $\Gamma(a) = \Gamma(-n) \rightarrow \infty$ e, conseqüentemente, o termo da Eq. (3.45), que antes divergia no infinito, agora, com a condição tende a zero! Usando a condição (3.46), temos

$$\frac{1}{2} (1 + |m| - \lambda_B^2 \kappa_B'^2) = -n. \quad (3.47)$$

Resolvendo (3.47) para E , obtemos

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{|m| - m}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad (3.48)$$

que são os níveis de energia de um elétron em um campo magnético uniforme no calibre simétrico. Examinando o espectro de energia (3.48), percebemos que se trata dos níveis de Landau. De fato, definindo a quantidade $n' = n + (|m| - m)/2$, as energias são reescritas como

$$E_{n',m} = \left(n' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad (3.49)$$

que é o espectro encontrado quando usamos o calibre de Landau (Eq. (3.30)). A solução do modelo é escrita como

$$\psi_{n,m}(r, \varphi) = C_{n,m} e^{im\varphi} \left(\frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4\lambda_B^2}\right) M\left(-n, 1 + |m|, \frac{r^2}{2\lambda_B^2}\right), \quad (3.50)$$

onde $C_{n,m}$ é a constante de normalização, e pode ser encontrada por

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty |\psi(r, \varphi)|^2 r dr d\varphi = 1. \quad (3.51)$$

Na descrição acima, foi considerada somente a presença de um campo magnético uniforme B . Podemos, contudo, considerar uma combinação linear de campos magnéticos, como por exemplo, a descrita pelo calibre

$$\mathbf{A} = \frac{Br}{2}\hat{\varphi} + \frac{l\hbar}{er}\hat{\varphi}, \quad (3.52)$$

onde o primeiro termo configura o calibre simétrico (Eq. (3.32)) e o segundo termo o campo magnético de AB (Eq. (3.18)). Todos os resultados encontrados nesta seção permaneceriam válidos se usássemos a combinação de campos magnéticos descrito acima, desde que façamos a mudança

$$m \rightarrow m - l. \quad (3.53)$$

O comportamento dos níveis de Landau em função do campo magnético tem como consequências inúmeros fenômenos oscilatórios [130]. Por exemplo, as oscilações de SdH, as quais foram resumidamente comentadas acima. A origem desses fenômenos oscilatórios está relacionada à evolução da energia de Fermi entre os níveis de Landau. De fato, podemos verificar na Fig. (4), que a energia de separação entre níveis de Landau consecutivos depende de ω_c e, portanto, aumenta à medida que o campo magnético aumenta. Além disso, dada uma amostra mesoscópica, sabe-se que o número de estados ocupados em cada nível de Landau, ou seja, a densidade de estados, também aumenta quando o campo magnético aumenta (veja a Ref. [1], por exemplo). Portanto, se há n níveis de Landau ocupados para um determinado valor de B , então o aumento do campo magnético faz com que mais estados estejam disponíveis nos níveis inferiores. Isso posto, então o nível n vai sendo desocupado à medida que o campo magnético aumenta. Quando o nível é totalmente desocupado, a energia de Fermi salta para o nível imediatamente abaixo. Na Fig. 5, mostramos o comportamento da energia de Fermi em função do campo magnético em uma amostra retangular feita de GaAs. Nesse tipo de modelo, podemos considerar que os estados de energia disponíveis são os níveis de Landau. Podemos observar crescimentos lineares seguidos por mudanças abruptas da energia de Fermi em função de B . O crescimento linear corresponde à situação em que a energia de Fermi está em um nível de Landau. A mudança abrupta ocorre quando o nível é totalmente desocupado⁷.

Um outro exemplo de fenômeno oscilatório, além das oscilações de SdH, são as oscilações da magnetização, conhecidas como oscilações de dHvA [130, 138]. Para que o fenômeno seja verificado, a amostra deve ter um alto grau de pureza e estar em um ambiente de baixas temperaturas, no qual atuam fortes campos magnéticos externos [130, 139]. O efeito dHvA é semelhante ao de Efeito SdH. No entanto, uma diferença é que o último ocorre devido aos fenômenos dissipativos na amostra, enquanto que o primeiro é uma propriedade da termodinâmica [136].

⁷ No Cap. 8, veremos que a presença de estados de borda elimina os saltos abruptos observados na Fig. 5.

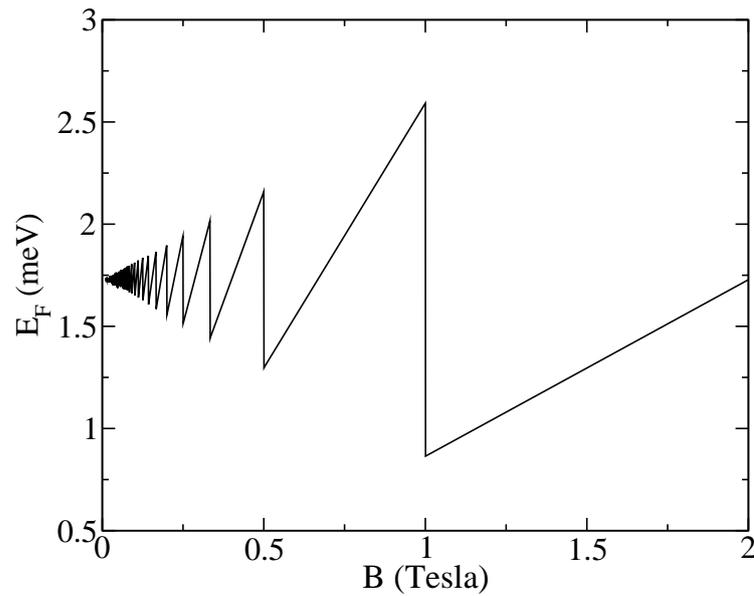


Figura 5 – A energia de Fermi de uma amostra mesoscópica retangular. A curva acima é obtida a partir do fator de preenchimento, o qual corresponde ao número de níveis de Landau ocupados [1, 2].

Ressaltamos que as oscilações de AB também são observadas na magnetização [140, 141, 142]. Contudo, elas não estão relacionadas às desocupações dos níveis de Landau, como é o caso das oscilações de dHvA. Elas resultam de interseções periódicas, com período ϕ_0 , de estados de energia com a energia de Fermi. Para melhor compreender essa informação, vamos considerar um sistema com um número de elétrons fixo para todo valor de B , ou seja, o número de estados ocupados deve permanecer constante ao longo de todo intervalo de campo magnético. Verifica-se que, para determinados valores de B , um estado, antes ocupado, passa a ser um estado desocupado. Em outras palavras, ele está acima da energia de Fermi. Obviamente, que um outro estado precisa ser ocupado, de modo a manter o número de ocupações constante. Essas mudanças de ocupações eletrônicas, as quais ocorrem em intervalos periódicos de B , com período ϕ_0 , são o gatilho para as oscilações do tipo AB. Um detalhe para que essas oscilações sejam observadas, é que o sistema deve apresentar estados com características de estados de bordas. O potencial radial, descrito no Cap. 2, é um excelente modelo que permite a observação das oscilações de AB nas propriedades termodinâmicas.

4 A mecânica quântica de uma partícula em uma superfície curva

Neste capítulo, vamos fazer uma revisão da equação de movimento que descreve a dinâmica de uma partícula sobre uma superfície não-trivial. A abordagem que seguimos é aquela devido à da Costa [49], a qual é largamente usada no estudo do movimento de partículas em superfícies curvas. Na Física da Matéria Condensada esse formalismo é a base para o estudo de materiais não planares. A abordagem empregada por da Costa implica no aparecimento de um potencial induzido pela superfície. Como veremos, esse potencial depende das curvaturas média e Gaussiana. Como caso particular de uma superfície curva, vamos considerar a superfície de um cone. Especificamente, vamos obter a parametrização dessa superfície, da qual podemos extrair a métrica e as curvaturas média e Gaussiana e, portanto, o potencial geométrico. Esses resultados serão úteis nos Caps. 5 e 6 quando estivermos interessados no estudo do comportamento eletrônico em amostras cônicas.

4.1 A equação de Schrödinger reformulada

Considere o modelo que descreve o movimento de uma partícula vinculada a mover-se sobre uma superfície curva S . Podemos incluir o efeito de um campo magnético via potencial vetor \mathbf{A} e de um campo elétrico via potencial escalar U . Em outras palavras, isso pode ser implementado facilmente através das substituições vetorial e escalar, respectivamente [143]. Devemos derivar analiticamente a equação de Schrödinger de modo que ela seja válida para qualquer geometria 2D. Essa equação deve descrever a dinâmica de partículas em variedades curvas na presença de campos elétricos e magnéticos. Assim como no trabalho de da Costa, devemos mostrar que não existe acoplamento entre o campo e a curvatura da superfície. Esse é um requisito necessário, uma vez que queremos que a dinâmica sobre a superfície seja separada da dinâmica na transversal. Isso é feito em seguida por meio de um calibre apropriado e sem aproximações. Portanto, começamos com a equação de Schrödinger na forma covariante, contendo ambos os potenciais elétrico e vetorial,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}G^{ij}D_iD_j\psi + QU\psi, \quad (4.1)$$

onde o tensor métrico G_{ij} e seu inverso G^{ij} têm sido introduzidos para levarmos em conta a geometria do espaço. Na Eq. (4.1), i, j, k referem-se aos índices espaciais e assumem valores 1, 2, 3. Também fazemos uso da convenção de soma de Einstein para as componentes

covariantes e contravariantes do tensor. A derivada covariante de calibre D_j é dada por

$$D_j = \nabla_j - \frac{iQ}{\hbar} A_j, \quad (4.2)$$

onde Q é a carga da partícula e A_j são as componentes do potencial vetor \mathbf{A} . Para uma variedade arbitrária, o operador ∇_j é definido como

$$\nabla_j v^i = \partial_j v^i + \Gamma_{jk}^i v^k, \quad (4.3)$$

onde v^i são as componentes contravariantes de um campo vetorial $3D \mathbf{v}$, Γ_{jk}^i são os símbolos de Christoffel e ∂_j é a derivada com respeito à variável espacial q_j .

Definindo o potencial escalar $A_0 = -U$, podemos definir uma derivada covariante de calibre para a variável temporal como

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

de modo que a equação de Schrödinger (4.1) pode ser reescrita como

$$i\hbar D_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} G^{ij} D_i D_j \psi. \quad (4.5)$$

Nesta equação, a invariância de calibre pode ser verificada fazendo uso das seguintes transformações:

$$A_j \rightarrow A'_j = A_j + \partial_j \gamma, \quad (4.6a)$$

$$A_0 \rightarrow A'_0 = A_0 + \partial_t \gamma, \quad (4.6b)$$

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi e^{\frac{i}{\hbar} Q \gamma}, \quad (4.6c)$$

onde γ é uma função escalar. Usando a Eq. (4.2), a Eq. (4.5) pode ser escrita mais explicitamente como

$$i\hbar D_0 \psi = \frac{1}{2\mu} \left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{G}} \partial_i (\sqrt{G} G^{ij} \partial_j \psi) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{G}} \partial_i (\sqrt{G} G^{ij} A_j) \psi + 2iQ\hbar G^{ij} A_j \partial_i \psi + Q^2 G^{ij} A_i A_j \psi \right], \quad (4.7)$$

onde $G = \det(G_{ij})$. A equação (4.7) é a equação de Schrödinger covariante escrita em um sistema de coordenadas curvilínea $3D$ genérico, quando campos elétricos e magnéticos são incluídos. Até então, nenhum calibre foi escolhido, mas o potencial vetor $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$, válido para qualquer calibre e qualquer campo magnético, será mantido ao longo do formalismo.

Antes de aplicarmos o formalismo de da Costa, devemos descrever o sistema de coordenadas. Basicamente, a descrição do sistema é análoga ao proposto por da Costa.

Ela é dada como segue. A superfície S é parametrizada por $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2)$, onde \mathbf{r} é o vetor posição de um ponto arbitrário sobre a superfície. O espaço 3D na vizinhança de S pode ser parametrizado como

$$\mathbf{R}(q_1, q_2, q_3) = \mathbf{r}(q_1, q_2) + q_3 \mathbf{n}(q_1, q_2), \quad (4.8)$$

onde $\mathbf{n}(q_1, q_2)$ é um vetor unitário normal a superfície S . Para fins de esclarecimento, vamos introduzir os índices a, b para indicar os parâmetros da superfície, os quais, evidentemente, assumem valores 1, 2. A relação entre o tensor métrico 3D,

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_j}, \quad (4.9)$$

e o 2D induzido,

$$g_{ab} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_a} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_b}, \quad (4.10)$$

é dada 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 α_{ab} é a matriz de curvatura de Weingarten para a superfície [49]. A forma do tensor métrico dada na Eq. (4.11) permite a separação da equação de Schrödinger (4.7) em uma parte superficial para $a, b = 1, 2$ e outra normal. Além disso, o potencial de confinamento, $V_\lambda(q_3)$, tem o papel de localizar a partícula sobre a superfície S , onde λ é um parâmetro que mede a magnitude do confinamento. Seguindo o trabalho de da Costa, agora devemos obter uma função de onda superficial que depende somente das coordenadas (q_1, q_2) . Para isso, propomos a seguinte função de onda separada:

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_S(q_1, q_2) \chi_n(q_3). \quad (4.12)$$

Essa função de onda separada é apenas uma hipótese e deve ser verificada. A condição de conservação da norma fornece a relação

$$\psi(q_1, q_2, q_3) = [1 + Tr(\alpha)q_3 + det(\alpha)q_3^2]^{-1/2} \chi(q_1, q_2, q_3). \quad (4.13)$$

Com essa condição em mãos, podemos substituí-la na Eq. (4.7). Em seguida, devemos levar em conta o efeito do potencial $V_\lambda(q_3)$: no limite de confinamento, a função de onda está localizada sobre a superfície S por duas barreiras de potenciais degraus de ambos os lados da superfície. Isso significa que o valor da função de onda é diferente de zero apenas na vizinhança de S . Assim, podemos realizar o limite $q_3 \rightarrow 0$ na equação de Schrödinger. Como resultado, encontramos

$$\begin{aligned} i\hbar D_0 \chi = & \frac{1}{2\mu} \left\{ -\frac{\hbar^2}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g} g^{ab} \partial_b \chi) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{g}} \partial_a (\sqrt{g} g^{ab} A_b) \chi + 2iQ\hbar g^{ab} A_a \partial_b \chi \right. \\ & + Q^2 [g^{ab} A_a A_b + (A_3)^2] \chi - \hbar^2 (\partial_3)^2 \chi + iQ\hbar (\partial_3 A_3) \chi + 2iQ\hbar A_3 (\partial_3 \chi) \\ & \left. - \hbar^2 \left(\left[\frac{1}{2} Tr(\alpha) \right]^2 - det(\alpha) \right) \chi \right\} + V_\lambda(q_3) \chi, \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde $g = \det(g_{ab})$ e todas as componentes de \mathbf{A} bem como suas derivadas são calculadas em $q_3 = 0$. Da equação (4.14), podemos concluir o seguinte: *Não existe acoplamento entre o campo magnético e a curvatura da superfície, independente da forma da superfície, do campo magnético e do calibre a serem considerados.* Em outras palavras, não há acoplamento entre as variáveis da superfície e da transversal. De fato, na Eq. (4.14), não aparecem termos mistos envolvendo A_j e a matriz de curvatura α_{ab} . Esse resultado conflita com o encontrado por Ensinosa [144], onde surgimento do acoplamento entre o campo e a curvatura é devido a escolha de um calibre particular na derivação da fórmula.

Na Eq. (4.14), temos a presença do termo

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha) \right]^2 - \det(\alpha) \right), \quad (4.15)$$

conhecido como potencial geométrico [49]. Podemos reescrever o potencial geométrico como

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\mathcal{M}^2 - \mathcal{K}), \quad (4.16)$$

onde

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha) = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) \quad (4.17)$$

e

$$\mathcal{K} = \det(\alpha) = \frac{1}{g} \det(h_{ij}) \quad (4.18)$$

são as curvaturas média e Gaussiana, respectivamente. Os g_{ij} 's dão dados pela Eq. (4.10), enquanto que os h_{ij} 's correspondem aos elementos da segunda forma fundamental, dados por [145]

$$h_{11} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2} \cdot \mathbf{n}, \quad h_{12} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} \cdot \mathbf{n}, \quad h_{22} = \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} \cdot \mathbf{n}. \quad (4.19)$$

Também, podemos escrever as curvaturas média e gaussiana em termos das curvatures principais da superfície, k_1 e k_2 [49, 146]:

$$\mathcal{M} = \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad \mathcal{K} = k_1 k_2. \quad (4.20)$$

A curvatura média é uma medida extrínseca da superfície, ou seja, depende de como a superfície está inserida no espaço. Por outro lado, a curvatura Gaussiana é um propriedade intrínseca, ou seja, independe de como a superfície está inserida no espaço [145, 146, 147].

A seguir, vamos verificar que o procedimento acima preserva a invariância de calibre da equação resultante. Definindo um novo tensor métrico \tilde{G} como

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

podemos reescrever a Eq. (4.14) em uma forma compacta, dada por

$$i\hbar D_0\chi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\tilde{G}^{ij}\tilde{D}_i\tilde{D}_j\chi + V_S\chi + V_\lambda(q_3)\chi, \quad (4.22)$$

de modo que a invariância com respeito às transformações de calibre (4.6) fica evidente na equação acima.

Agora, dado que não existe acoplamento entre as variáveis relacionadas à superfície com as variáveis relacionadas à transversal, vamos demonstrar a separabilidade dos movimentos sobre a superfície e perpendicular a ela. Na Eq. (4.14) apenas o termo $A_3(q_1, q_2, 0)\partial_3\chi$ acopla o movimento ao longo de q_3 com o movimento sobre S . Desde que a invariância de calibre da Eq. (4.22) é preservada, podemos impor um calibre que permite cancelar a componente A_3 do potencial vetor, que por sua vez, cancela o termo de acoplamento. Aplicando as transformações de calibre (4.6), a escolha mais adequada para γ é

$$\gamma(q_1, q_2, q_3) = -\int_0^{q_3} A_3(q_1, q_2, z)dz. \quad (4.23)$$

Assim, obtemos

$$A'_3 = 0, \quad \partial_3 A'_3 = 0, \quad (4.24)$$

e uma vez tendo fixado o limite de integração inferior a zero, no limite $q_3 \rightarrow 0$, A_1 e A_2 permanecem inalterados. Após o uso da transformação de calibre, podemos separar a equação de Schrödinger em duas equações independentes, a saber

$$i\hbar\partial_t\chi_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\partial_3)^2\chi_n + V_\lambda(q_3)\chi_n, \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\chi_S = & -\frac{1}{2\mu}\left[\frac{\hbar^2}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b\chi_S) + \frac{iQ\hbar}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}A_b)\chi_S + 2iQ\hbar g^{ab}A_a\partial_b\chi_S \right. \\ & \left. + Q^2g^{ab}A_aA_b\chi_S\right] + V_S\chi_S + QU\chi_S. \end{aligned} \quad (4.26)$$

A Eq. (4.25) é a equação de Schrödinger 1D para uma partícula confinada pelo potencial V_λ , enquanto que a Eq. (4.26) descreve a dinâmica de uma partícula movendo-se sobre a superfície sob efeitos de campos elétrico e magnético. Note que a separação da dinâmica foi obtida analiticamente sem qualquer aproximação. Para finalizar esta Seção, podemos concluir que, com uma escolha apropriada do calibre, o movimento sobre a superfície e o movimento transversal são desacopladas. No trabalho de Ensinosa [144] essa separação não é evidente por causa da escolha não apropriada feita para o calibre.

4.2 A métrica do cone

Assim como na Ref. [148], fazemos um estudo em conexão com a descrição de distribuição contínua de deslocações e disclinações no contexto da geometria de Riemann-

Cartan [71]. A partícula está vinculada a uma superfície com uma disclinação localizada na região $r = 0$, com $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, a qual descreve uma superfície cônica.

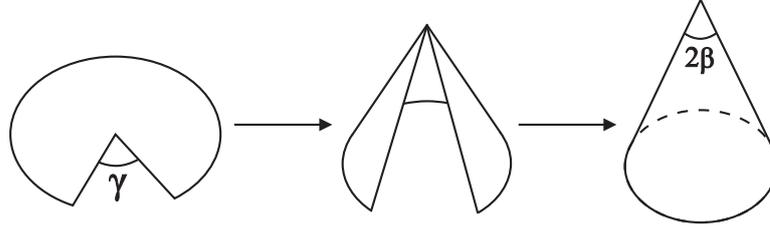


Figura 6 – Superfície cônica de déficit angular γ .

A Fig. (6) mostra o processo de construção de um cone a partir de uma folha plana, onde uma seção angular é removida com uma posterior identificação das fronteiras produzidas. Se γ é o ângulo que define a seção removida, então a superfície remanescente corresponde a um setor angular dado por $2\pi\alpha = 2\pi - \gamma$. Sendo 2β o ângulo de abertura do cone, podemos encontrar a seguinte relação

$$\alpha = \sin \beta. \quad (4.27)$$

Este resultado é obtido identificando o comprimento de um círculo em torno do cone sem o setor, dado por $2\pi\alpha r$, com o comprimento deste círculo em termos de 2β , dado por $2\pi r \sin \beta$. Quanto mais próximo α se aproxima da unidade (ou 2β tendendo a π), mais o cone se aproxima do plano. Para $\alpha = 1$, o cone se torna um plano. Se $\alpha > 1$, a superfície corresponde a uma inserção de um setor, isto é, $2\beta > \pi$. Chamamos a superfície resultante de anti-cone.

Vamos considerar um ponto $P(x, y, z)$ sobre a superfície de um cone de ângulo de abertura 2β . A distância entre o vértice do cone e o ponto $P(x, y, z)$ é r . A parametrização é dada por [149]

$$\mathbf{r}(r, \theta) = \alpha r \cos \theta \hat{x} + \alpha r \sin \theta \hat{y} + r\sqrt{1 - \alpha^2} \hat{z}, \quad (4.28)$$

onde $0 < r < \infty$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e α é dado pela Eq. (4.27) Usando a Eq. (4.10) para calcular os elementos da métrica da superfície, obtemos $g_{11} = 1$, $g_{22} = \alpha^2 r^2$, $g_{12} = g_{21} = 0$, enquanto que as relações dadas pela Eq. (4.19) nos permite calcular os elementos da segunda forma fundamental, $h_{11} = h_{12} = h_{21} = 0$, $h_{22} = \alpha r \sqrt{1 - \alpha^2}$. Desses resultados, obtemos a métrica do cone [150, 151]

$$ds^2 = dr^2 + \alpha^2 r^2 d\theta^2, \quad (4.29)$$

e também calculamos as curvaturas média (4.17) e gaussiana (4.18) da superfície cônica [152],

$$\mathcal{M}_{cone} = \frac{\sqrt{1 - \alpha^2}}{2\alpha r}, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{K}_{cone} = \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r}. \quad (4.31)$$

respectivamente. Consequentemente, obtemos o potencial geométrico (Eq. 4.16) na métrica do cone,

$$V_S(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1 - \alpha^2}{4\alpha^2 r^2} + \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right]. \quad (4.32)$$

Note que a curvatura gaussiana (4.31) é dada em termos da função $\delta(r)$, ou seja, ela descreve uma singularidade em $r = 0$, justo no ápice do cone.

5 Efeitos de curvatura na energia dos estados, na magnetização e corrente persistente de um anel mesoscópico

Considere uma amostra anelar, isto é, um sistema simplesmente não conexo, ou simplesmente, um anel. Como já foi mencionado antes, anéis são caracterizados por exibirem um vasto número de fenômenos físicos. Alguns exemplos são a corrente persistente, condutância, propriedades ópticas, dentre outras. Um modelo idealizado corresponde ao caso de um anel 1D, o qual deu contribuições importantes para o entendimento de alguns fenômenos físicos. Contudo, para um entendimento melhor desses fenômenos, se faz necessário considerar um anel com largura finita. Teoricamente, há algumas maneiras de retratar esse sistema físico. Aqui, faremos uso do potencial radial proposto por Tan e Inkson [19]. Esse modelo nos permite controlar a largura do anel, considerando desde o caso idealizado de um anel 1D até um anel de largura finita. Por exemplo, na Ref. [20], Tan e Inkson consideraram dois modelos de anéis de larguras diferentes, um estreito e outro largo. O anel é considerado sobre uma amostra curva especificamente uma superfície cônica. Portanto, para encontrar as autofunções e autovalores corretos, fazemos uso da equação de Schrödinger que descreve o movimento de um elétron em uma superfície curva dada pela Eq. (4.26). O potencial radial, o qual descreve o anel, é introduzido por substituição mínima.

Na métrica do cone, vimos que o potencial geométrico contém um potencial tipo δ . Para resolver um Hamiltoniano com um termo singular, como um potencial tipo δ , podemos fazer uso do método de extensão auto-adjunta de operadores em mecânica quântica. Contudo, veremos que isso não será necessário e o sistema terá soluções bem conhecidas da literatura. Encontradas as autofunções e os seus respectivos autovalores, podemos estudar as propriedades físicas do anel, como por exemplo, o raio dos estados. Em seguida, analisamos o comportamento da energia de Fermi, da magnetização e da corrente persistente em função do campo magnético. As comparações entre os casos sem curvatura e com curvatura nos darão a dimensão de como a curvatura influencia esses fenômenos físicos. As análises contidas neste Capítulo resultaram nos artigos intitulados “Effects of curvature on the electronic states of a two-dimensional mesoscopic ring” [104] e “Study of electronic properties, magnetization and persistent currents in a mesoscopic ring by controlled curvature [105]”.

5.1 As autofunções e os autovalores de energia

O Hamiltoniano que descreve o movimento de uma partícula carregada sujeita a campos magnéticos externos e vinculada a uma superfície curva foi determinado na Sec. 4.1. Na métrica do cone dada pela Eq. (4.29), essa equação descreve o movimento de uma partícula sujeita a campos magnéticos externos e vinculada a mover-se sobre a superfície de um cone. Por ser um potencial radial controlável, a partícula deve se mover apenas em uma região finita da superfície. Na Sec. 2, mostramos que o potencial radial proposto por Tan e Inkson [19] modela um anel bidimensional. Para os campos e potenciais envolvidos, consideramos o potencial vetor efetivo

$$\mathbf{A} = \frac{Br}{2\alpha}\hat{\varphi} + \frac{l\hbar}{e\alpha r}\hat{\varphi}, \quad (5.1)$$

o qual implica no campo magnético efetivo

$$\mathbf{B} = B\hat{z} + \frac{l\hbar}{e\alpha r}\delta(r)\hat{z}. \quad (5.2)$$

O primeiro termo na equação acima representa o campo magnético externo, enquanto o segundo termo representa o campo magnético de um solenoide de raio $r \rightarrow 0$ (um tubo de fluxo de raio nulo). O potencial radial (2.3) é inserido na Eq. (4.26) através da substituição

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - V(r). \quad (5.3)$$

Além disso, uma vez que o potencial radial independe do tempo, podemos separar as componentes espaciais da componente temporal e resolver a equação de Schrödinger para estados estacionários. Portanto, a equação de Schrödinger resultante é dada por

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\alpha^2 r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar c \alpha^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right) - \frac{e^2 B^2 r^2}{4\hbar^2 \alpha^2} \right] + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1 - \alpha^2}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right] + \left(\frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \right) \right\} \chi_S(r, \varphi) = E \chi_S(r, \varphi). \quad (5.4)$$

Como não estamos considerando no modelo a presença de campos elétricos, então o potencial U pode ser negligenciado. Podemos usar o seguinte ansatz:

$$\chi_S(r, \varphi) = e^{im\varphi} f_m(r), \quad (5.5)$$

onde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, e $f_m(r)$ é uma função que depende unicamente de r sendo rotulada por m . Substituindo esse ansatz na Eq. (5.4), obtemos a equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) f_m(r) + V_{efe} f_m(r) = E_m f_m(r), \quad (5.6)$$

onde temos rotulado a energia como $E = E_m$ e definido o potencial efetivo

$$V_{efe} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{L^2}{r^2} + \frac{r^2}{4\lambda^4} - \kappa^2 \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1 - \alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r}. \quad (5.7)$$

Na expressão para o potencial efetivo (5.7),

$$\kappa = \frac{(m-l)\mu\omega_c}{\hbar\alpha^2} + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \quad (5.8)$$

é um parâmetro,

$$L = \sqrt{\left(\frac{m-l}{\alpha}\right)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} - \frac{1-\alpha^2}{4\alpha^2}} \quad (5.9)$$

é o momento angular efetivo, e

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \quad (5.10)$$

é o comprimento magnético efetivo, onde ω é a frequência ciclotrônica efetiva, dada por

$$\omega = \sqrt{\frac{\omega_c^2}{\alpha^2} + \omega_0^2}, \quad (5.11)$$

onde ω_0 e ω_c foram definidos nas Eqs. (2.10) e (3.40), respectivamente. Destacamos a semelhança entre os potenciais efetivos da Eq. (3.37) e o da Eq. (5.7) a menos do potencial delta. Após uma comparação direta entre eles, encontramos as seguintes correspondências:

$$m \rightarrow L, \quad \lambda_B \rightarrow \lambda, \quad \kappa_B \rightarrow \kappa. \quad (5.12)$$

É importante enfatizar que a presença da função δ (que é um potencial de alcance zero) na Eq. (5.6) sugere que soluções irregulares devam ser levadas em conta nessa abordagem. De acordo com a teoria de von Neumann de extensões auto-adjuntas [153], a necessidade da inclusão de soluções irregulares provém do fato de que o Hamiltoniano dado pelo lado esquerdo da Eq. (5.4) não é auto-adjunto para $|L| < 1$ [154, 155]. No entanto, no momento angular efetivo, notamos a presença do termo $2a_1\mu/\hbar^2$ (veja a Eq. (5.9)), o qual impõe que o valor numérico de L seja maior que 1. Essa situação ficará mais clara quando considerarmos valores para os parâmetros a_1 e a_2 , de modo que o tamanho anel se aproxime dos modelos experimentais. Portanto, não há valor de L pertencente ao intervalo especificado acima. Por causa disso, podemos ignorar a função δ na equação radial (5.6) e considerar apenas a solução regular em $r = 0$. Assim, a equação radial tem a mesma forma da obtida na Sec. 3.3. O potencial efetivo fica escrito como

$$V_{efe} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{L^2}{r^2} + \frac{r^2}{4\lambda^4} - \kappa^2 \right). \quad (5.13)$$

Os autovalores de energia e as autofunções podem ser obtidos a partir dos resultados das Eqs. (3.48) e (3.50), respectivamente, bastando fazer uso das correspondências (5.12). Assim, as energias são dadas por

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{L}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\hbar(m-l)\omega_c}{2\alpha^2} - V_0, \quad (5.14)$$

e as autofunções por

$$\psi_{n,m}(r, \varphi) = C_{n,m} e^{im\varphi} \left(\frac{r^2}{2\lambda^2} \right)^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4\lambda^2}\right) M\left(-n, 1+L, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right), \quad (5.15)$$

onde $C_{n,m}$ é a constante de normalização. O número quântico n , onde $n = 0, 1, 2, \dots$, caracteriza o movimento radial da partícula. Além disso, ele rotula as diferentes sub-bandas de energias ¹ em um dado campo magnético. O número quântico m , onde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, caracteriza o movimento angular da partícula.

5.2 Propriedades físicas. Análise numérica

Nesta seção, analisamos o espectro de energia e as outras propriedades físicas relevantes do anel. Na análise numérica, consideramos um anel bidimensional definido pela Eq. (2.3) com raio médio $r_0 = 132$ nm. A estrutura consiste de GaAs com uma massa efetiva $\mu = 0.067 \mu_e$, onde μ_e é a massa do elétron. O potencial parabólico dado pela Eq. (2.9) é definido por $\hbar\omega_0 = 1.8$ meV. Esses parâmetros foram usados por Fuhrer et. al. [156] para simular um anel bidimensional, o que permitiu analisar experimentos de magnetotransporte em anéis fechados no regime do bloqueio de Coulomb.

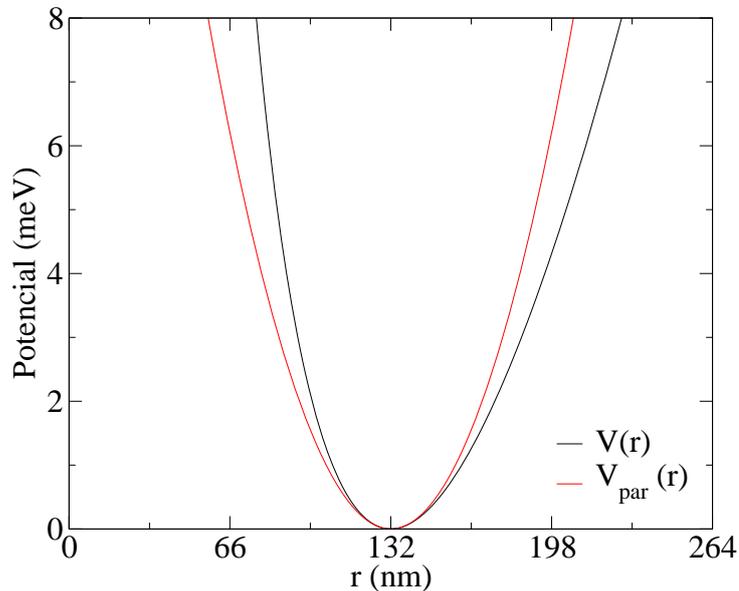


Figura 7 – Esboços dos potenciais radial (linha preta sólida) e parabólico (linha vermelha) dados pelas Eqs. (2.3) e (2.9), respectivamente. O potencial radial descreve um anel de raio médio $r_0 = 132$ nm. O potencial parabólico é definido com $\hbar\omega_0 = 1.8$ meV.

Na Fig. 7, mostramos o esboço do potencial radial (5.13) usando os parâmetros citados acima. Além disso, também plotamos o potencial parabólico (Eq. (2.9)) para que

¹ Uma sub-banda de energia é caracterizada por estados de energia $E_{n,m}$ com o mesmo número quântico n , mas diferentes valores de m . ou seja, temos distintas relações de dispersão rotuladas pelo número quântico n [124].

uma comparação direta entre os dois modelos possa ser feita. Podemos observar que os dois modelos se equivalem apenas para baixas energias, ou seja, até certo valor da magnitude do potencial. Em energias mais altas, a diferença entre os dois modelos é mais evidente.

Como dissemos acima, para um dado campo magnético, há inúmeras sub-bandas de energia, cada uma rotulada por um número quântico n . O perfil da Eq. (5.14) mostra que essas sub-bandas não são parabólicas, como ocorre por exemplo, para o caso de uma fita bidimensional [157, 19]. Cada sub-banda tem uma energia mínima. Usando as energias (5.14), podemos mostrar que, para um dado valor de campo magnético, o mínimo de todas as sub-bandas corresponde ao estado com $m = m_0$, dado por

$$m_0 = \frac{eBr_0^2}{2\hbar} \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{2\mu a_1} \frac{1 - \alpha^2}{4\alpha^2}}. \quad (5.16)$$

Para $\alpha = 1$, recuperamos o resultado obtido por Tan e Inkson [19], a saber

$$m_0 = \frac{eBr_0^2}{2\hbar}, \quad (5.17)$$

o qual corresponde ao número de quanta de fluxo atravessando um anel de raio efetivo r_0 . De fato, usando $l = \Phi/\phi_0$ com $\phi_0 = h/e$ (veja a Sec. 3.2.1), obtemos $m_0 = l$. Na ausência de campo magnético, o mínimo das sub-bandas é o estado com $m_0 = 0$.

Para campo magnético nulo, as sub-bandas são simétricas em torno do mínimo das sub-bandas com $m_0 = 0$. Neste caso, os estados são duplamente degenerados, isto é, $E_{n,m} = E_{n,-m}$. A dupla degenerescência nos estados do anel proveniente da ausência de campos magnéticos é uma consequência da simetria de rotação do sistema. Observe que não há simetria para estados pertencentes a diferentes sub-bandas como no caso dos pontos quânticos [158, 26]. Esta quebra de simetria é causada pelo potencial do anti-ponto quântico proporcional a r^{-2} no potencial radial (5.13). Outro resultado é que a energia de separação entre as sub-bandas adjacentes é igual a $\hbar\omega_0$.

Quando o sistema está sujeito a efeitos de curvatura, a simetria rotacional é preservada. Além disso, na ausência de campo magnético, também observamos que a energia de separação entre sub-bandas adjacentes é dada por $\hbar\omega_0$, ou seja, não muda. Uma das mais evidentes implicações físicas na estrutura eletrônica devido à curvatura é o aumento na energia dos estados com $m \neq 0$ à medida que o parâmetro α diminui. Ou seja, esse comportamento é uma consequência do efeito da curvatura no momento angular efetivo do sistema para estados com $m \neq 0$. Para $m = 0$, a energia deste estado tende a diminuir devido ao efeito da curvatura média, como podemos observar fazendo $m = 0$ na Eq. (5.14).

Quando um campo magnético é aplicado, ocorre uma mudança na configuração dos estados. Como vimos na Eq. (5.16), o mínimo das sub-bandas depende do campo magnético, de modo que a ocupação dos estados é alterada. Como consequência, a quebra

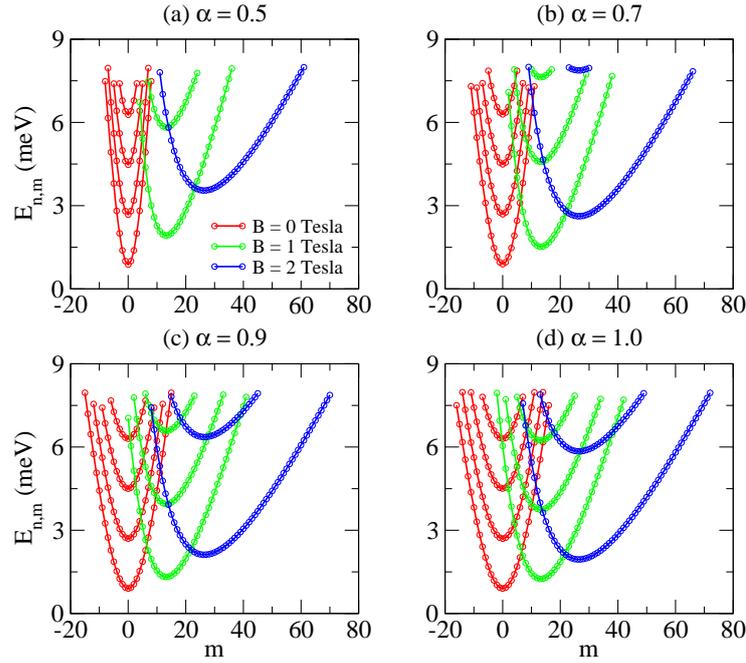


Figura 8 – As energias de um anel 2D, dadas pela Eq. (5.14), em função do número quântico m para alguns valores de α e uma energia de Fermi de $E_F = 8$ meV. Quando $B = 0$, as sub-bandas são todas simétricas. Para $B \neq 0$, a simetria é quebrada e o distanciamento entre as sub-bandas vizinhas aumenta. A presença da curvatura faz com que os efeitos do campo magnético sejam intensificados.

de simetria em relação ao mínimo das sub-bandas m_0 ocorre. Além disso a separação entre sub-bandas consecutivas é agora dada por $\hbar\omega$ e aumenta à medida que aumentamos o campo magnético. Para $\alpha < 1$, $\hbar\omega$ é maior do que aquele obtido quando $\alpha = 1$.

Na Fig. 8, mostramos o comportamento dos níveis de energia $E_{n,m}$ em função do número quântico m para $\alpha = 0.5, 0.7, 0.9, 1.0$, e alguns valores de campos magnéticos. Consideramos a energia de Fermi $E_F = 8$ meV, de modo que na ausência de campos magnéticos externos, há quatro sub-bandas ocupadas. Observe que o número de sub-bandas ocupadas independe da curvatura. De fato, como vimos acima, a distância de separação entre sub-bandas adjacentes é $\hbar\omega_0$, ou seja, independe do parâmetro α . As linhas sólidas definem as sub-bandas ocupadas, enquanto que os círculos correspondem aos estados ocupados em cada sub-banda. Podemos verificar que os estados são simétricos na ausência de campo magnético. Com a presença de curvatura, a energia dos estados aumenta, o que leva a uma diminuição no número de estados ocupados na energia Fermi. Portanto, para uma dada energia de Fermi, E_F , o número de estados com energia $E_{n,m} \leq E_F$ diminui quando o parâmetro α diminui. Adiante, analisaremos a magnetização e a corrente persistente em um anel isolado onde o número de elétrons permanece constante. Portanto, deveremos observar um maior número de sub-bandas ocupadas e o aumento na energia de Fermi quando $\alpha < 1$. Com a aplicação de um campo magnético, observa-se a quebra da simetria rotacional. Além disso, ocorre o aumento da separação entre as sub-bandas

vizinhas. Com a presença da curvatura, de fato, verifica-se um aumento dessa quantidade, como foi apontado acima.

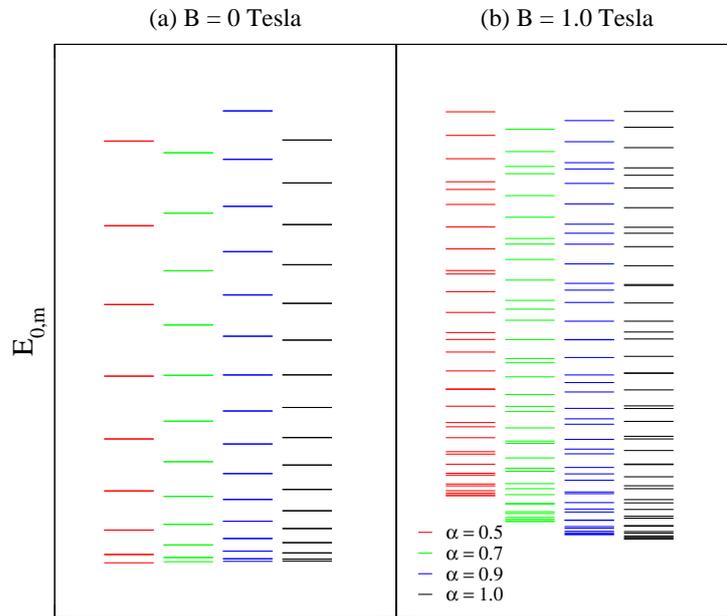


Figura 9 – Níveis de energia dos estados (Eq. (5.14)) de uma sub-banda com $n = 0$ para uma energia de Fermi $E_F = 8$ meV (veja a Fig. 8). Para $B = 0$ Tesla, cada horizontal linha corresponde a dois níveis de energia devido à simetria. O aumento da energia dos estados para $\alpha < 1$, resulta na redução no número de estados abaixo da energia de Fermi. Podemos ver que o estado $E_{0,0}$ tem um pequena redução de energia, quando α diminui. Para $B = 1$ Tesla, podemos observar um aumento na energia mínima da sub-banda quando $\alpha < 1$. Esse mínimo tende a aumentar para valores de α cada vez menores.

Na Fig. 9, mostramos os estados da sub-banda com $n = 0$ para $B = 0$ Tesla e $B = 1.0$ Tesla em conexão com a Fig. 8. Fazendo uma comparação entre os vários valores de α , podemos ver que, quando o campo magnético é nulo, a curvatura aumenta a separação entre os níveis de energia, de modo que o número de estados ocupados na energia de Fermi diminui. Observa-se também que apenas o estado com $m = 0$ tem a energia reduzida quando α diminui, conforme já mencionado acima. Por outro lado, com a presença do campo magnético, ocorre uma quebra de simetria. Podemos ver um aumento na energia mínima e uma diminuição no número de estados ocupados à medida que o parâmetro α diminui.

Na Fig. 10, mostramos o comportamento dos estados de energia em função do campo magnético. Podemos observar um comportamento aperiódico dos níveis de energia, o qual é mais evidente nas sub-bandas mais altas. Esse comportamento é uma consequência da penetração do campo magnético na região condutora do anel [19]. Nas Figs. 10(a)-(c), podemos observar, a exemplo da Fig. 8, um aumento na separação entre as energias das sub-bandas vizinhas. Aqui, esse efeito é mais evidente. A curvatura melhora esse efeito.

Isso faz com que uma sub-banda seja mais rapidamente desocupada. Veremos nas próximas seções que isso muda a localização dos máximos das oscilações observadas na energia de Fermi e também na magnetização.

Nesse ponto, também é importante verificar como o espectro de um anel 2D se comporta quando o fluxo magnético de AB varia. Como podemos ver na Fig. 11, os estados de energia são dados por um conjunto de quasi-parábolas transladadas, cada uma com seu centro localizado em $m = l$, de modo que o comportamento é periódico, em contraste com o caso do espectro em função do campo magnético B . Esse mesmo resultado é verificado no caso de um anel 1D (veja a Sec. 3.2). Assim, o papel do fluxo central não gera novos resultados. Na verdade, a presença do fluxo central é tão somente um parâmetro adiabático em termos do qual podemos calcular a corrente persistente usando a relação de Byers-Yang [28], o que facilita significativamente os cálculos.

Destacamos, também, a correção que aparece no mínimo das sub-bandas entre o acoplamento do parâmetro a_1 , o qual mede a intensidade do potencial anti-ponto no potencial radial (Eq. 2.3), com a curvatura média. Para os valores experimentais que estamos usando, essa correção é muito pequena. Com esse mesmo argumento, podemos mostrar que a correção da curvatura no momento angular efetivo resulta, principalmente, do parâmetro α acoplado ao número quântico m . A curvatura média contribui com uma

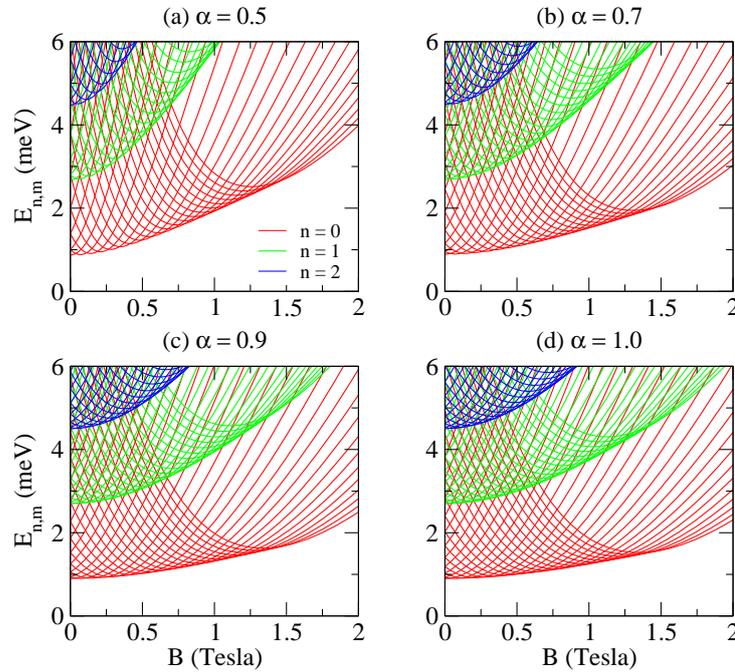


Figura 10 – Autovalores de energia de um anel 2D, dados pela Eq. (5.14), em função do campo magnético para alguns valores do parâmetro α . O campo magnético altera o mínimo das sub-bandas e aumenta o espaçamento de energia entre as sub-bandas adjacentes. A curvatura intensifica esses dois efeitos. Observe que as sub-bandas são despovoadas mais rapidamente quando α diminui.

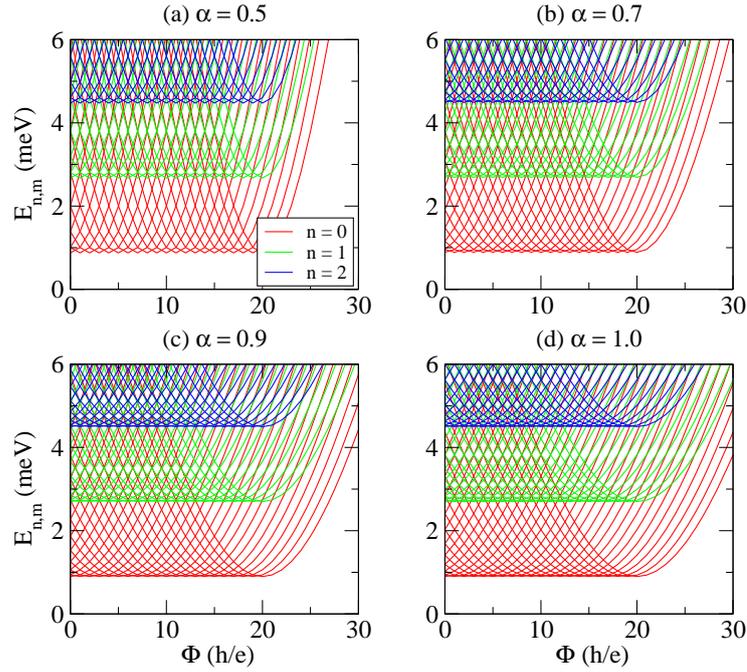


Figura 11 – Autovalores de energia de uma anel 2D, dados pela Eq. (5.14), como uma função do fluxo magnético de AB para alguns valores do parâmetro α . Os estados de energia são dados por um conjunto de quase parábolas com centros localizados em $m = l$.

correção muito pequena. Isso pode ser visto, por exemplo, analisando o estado com $m = 0$, onde podemos verificar que ele é o estado mais afetado pela curvatura média quando o campo magnético é nulo (veja a Fig. 9). Mas, ainda assim, esse efeito é muito pequeno.

Como feito na Sec. 3.3, a posição radial de um estado no anel é calculada a partir do potencial efetivo da Eq. (5.13). Assim, obtemos

$$r_{n,m} = (2L)^{\frac{1}{2}} \lambda. \quad (5.18)$$

A posição radial ocupada pelo mínimo das sub-bandas é calculada substituindo o resultado da Eq. (5.16) na Eq. (5.18). Obtemos

$$r_{n,m_0} = r_0 \left(1 - \frac{1 - \alpha^2}{4\alpha^2} \frac{\hbar^2}{2a_1\mu} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (5.19)$$

onde r_0 é o raio médio do anel. Se $\alpha = 1$, o raio do mínimo das sub-bandas corresponde justamente ao raio médio do anel! Considerando $\alpha < 1$, esse valor é ligeiramente corrigido pela curvatura, mas especificamente, pela curvatura média (Eqs. 4.17). Essa correção é semelhante a que ocorre no caso do mínimo das sub-bandas (veja a Eq. 5.16). Embora o mínimo das sub-bandas mude com o campo magnético, a posição radial ocupada por m_0 é independente do campo magnético e sempre igual a r_{n,m_0} . Para $B = 0$ Tesla, o mínimo das sub-bandas dado pela Eq. (5.16) é $m_0 = 0$. Assim, os estados com $m \neq 0$ ocupam posições radiais $r_{n,m} > r_{n,m_0}$, isto é, somente a região $r \geq r_{n,m_0}$ do anel é ocupada. À medida que a intensidade do campo magnético aumenta a partir de zero, a região interna

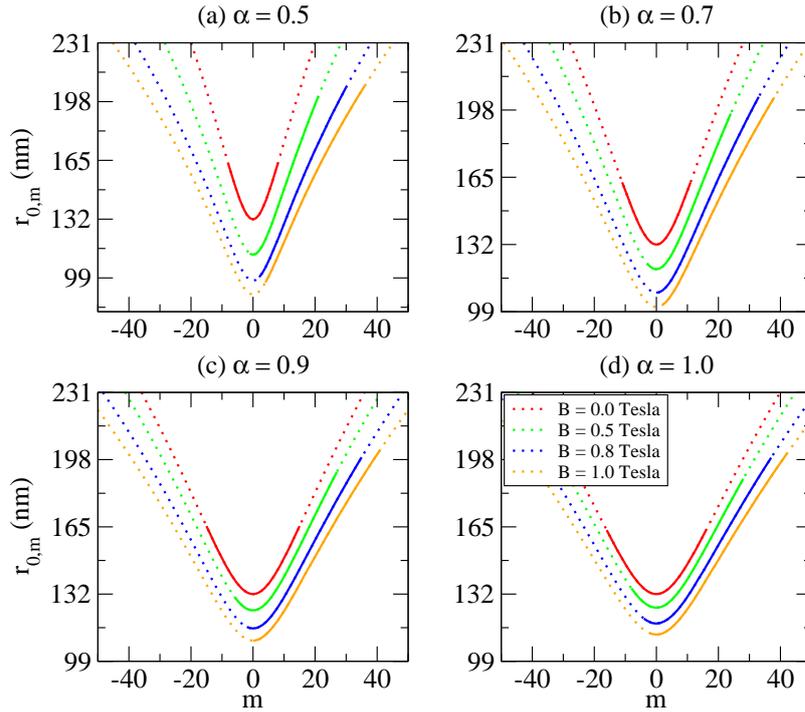


Figura 12 – O raio dos estados de um anel 2D (linhas pontilhadas), dado pela Eq. (5.18), como uma função do número quântico m para alguns valores do campo magnético e também do parâmetro α . As linhas contínuas representam a região condutora ocupada bem como os estados que estão abaixo da energia de Fermi, a qual consideramos como sendo $E_F = 8$ meV.

do anel, isto é, a região $r < r_{n,m_0}$ vai gradualmente sendo ocupada pelos estados com $|m| < m_0$. Em resumo, os estados passam a ocupar posições radiais menores que r_{n,m_0} . Esse comportamento dos estados no anel é uma característica marcante do potencial radial. De fato, se o confinamento radial é nulo, então o estado com $m = 0$ ocupa sempre a posição $r = 0$ e os demais estados podem ocupar qualquer posição radial $r > 0$, como foi observado na Sec. 3.3. Similarmente, podemos calcular a largura de um estado. Considerando a relação $E_{n,m} = V_{efe}(r)$, obtemos

$$d_{n,m} = 2\lambda\sqrt{2n+1}. \quad (5.20)$$

Para $n = 0$, obtemos o raio ciclotrônico do estado fundamental, $r_c = \lambda$, o qual na ausência de confinamento radial, recupera o resultado encontrado na literatura, $r_c = \lambda_B$, onde λ_B é o comprimento magnético (veja a Sec. 3.3).

Na Fig. 12, plotamos o raio dos estados $r_{0,m}$ (Eq. (5.18)) em função do número quântico m para alguns valores do campo magnético e também do parâmetro α . Consideramos a energia de Fermi $E_F = 8.0$ meV e olhamos somente para os estados da primeira sub-banda, $n = 0$. Isso permite observar a região condutora ocupada, tanto quanto o intervalo dos estados m ocupados, quando o anel quântico está sujeito a campos magnéticos e aos efeitos da curvatura. A região condutora ocupada é dada pela projeção das linhas

B (Tesla)	α	m_{min}	m_{max}	r_{min} (nm)	r_{max} (nm)
0	0.5	-8	8	131.87	163.31
	0.7	-11	11	131.95	162.51
	0.9	-15	15	132.00	165.33
	1.0	-16	16	132.00	163.37
0.5	0.5	-1	21	112.00	200.73
	0.7	-3	24	119.84	196.24
	0.9	-6	27	123.98	191.87
	1.0	-8	28	125.33	188.57
0.8	0.5	2	30	99.40	206.02
	0.7	0	33	108.30	204.48
	0.9	-2	35	115.12	199.16
	1.0	-4	37	117.55	198.94
1.0	0.5	4	36	96.40	206.86
	0.7	2	38	102.36	204.21
	0.9	0	41	109.157	202.83
	1.0	-2	42	112.11	200.75

Tabela 1 – A diferença $\Delta r = r_{max} - r_{min}$ mede a região condutora ocupada do anel e do intervalo de estados ocupados na sub-banda com $n = 0$ é dado por $[m_{min}, m_{max}]$. Os dados são referentes aos da Fig 12.

contínuas no eixo vertical, enquanto o intervalo dos estados abaixo da energia de Fermi é projetado no eixo horizontal. Como observado acima, o raio do estado referente ao mínimo das sub-bandas não depende do campo magnético e é sempre dado pela Eq. (5.18). Para $\alpha = 1.0$, ele assume justamente o valor do raio médio do anel, isto é, $r_0 = 132$ nm. Quando o campo magnético é zero, vimos acima que todos os estados com $|m| > |m_0|$ ocupam posições radiais à direita de $r_0 = 132$ nm, de modo que somente a região condutora externa do anel é ocupada. Essa situação está ilustrada na Fig. 12. A curvatura diminui o número de estados, mas a região condutora não têm variações significantes. Quando o campo magnético é aplicado, o raio dos estados diminui, de modo que a região condutora interna do anel passa a ser ocupada. A curvatura intensifica os efeitos do campo magnético. Para esclarecer melhor as implicações físicas desses efeitos, na Tabela 1, mostramos os valores de m_{min} , m_{max} , r_{min} e r_{max} referentes aos dados da Fig. 12. Note que o valor de r_{min} obtido quando o campo magnético é zero é exatamente o raio do estado m_0 dado pela Eq. (5.19), pois ele não depende do campo magnético, como já comentamos acima. Dessa forma, podemos verificar que a correção em r_{n,m_0} devido ao acoplamento da curvatura média com o parâmetro a_1 , o qual mede a intensidade do potencial do anti-ponto quântico, é muito pequena.

Na Fig. 13, esboçamos a densidade de probabilidade de alguns estados da primeira sub-banda para $\alpha = 0.7$. Quando $B = 0$ Tesla, a densidade de probabilidade do estado com $m = 0$ é máxima para $r_0 = 132$ nm. Todos os estados com $|m| > m_0$ têm amplitudes máximas quando $r > r_0$. Aplicando um campo magnético de 2 Tesla, observamos que

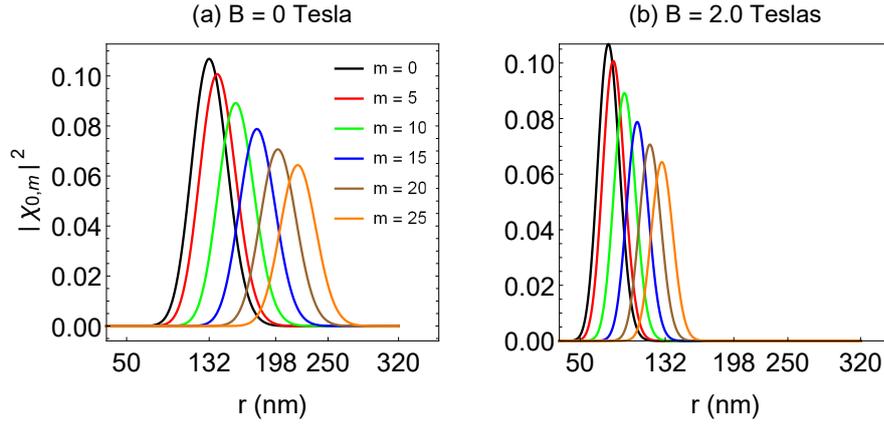


Figura 13 – Densidade de probabilidade como uma função da coordenada radial para alguns estados (Eq. (5.15)) da sub-banda com $n = 0$ e para o parâmetro $\alpha = 0.7$.

a amplitude máxima dos estados muda para $r < r_0$. Assim, os raios $r_{n,m}$ dos estados diminuem à medida que o campo magnético é aumentado. Isso está em concordância com o que dissemos sobre a distribuição radial dos estados na Seç. 5.2.

Conforme mostrado na Eq. (5.16) e também explicitamente na Fig. 8, o mínimo das sub-bandas, assume vários valores quando mudamos o campo magnético. Assim, podemos inferir que a amplitude da densidade de probabilidade de um estado muda com o campo magnético e, como resultado, observamos um valor máximo quando um estado com um dado m corresponde ao mínimo das sub-bandas. Isso é mostrado na Fig. 14, onde exibimos o comportamento da densidade de probabilidade de alguns estados da sub-banda com $n = 0$ em função do campo magnético B para $\alpha = 0.7$.

Também pode ser inferido a partir da densidade de probabilidade que a curvatura modifica o raio dos estados. Na Fig. 15(a), onde consideramos o estado com $m = 5$ e fixamos o campo magnético em $B = 0$ Tesla, vemos um aumento no raio do estado. Na Fig. 15(b), fixamos o valor do campo magnético em $B = 1$ Tesla e consideramos o estado com $m = 20$, que está à direita do mínimo das sub-bandas m_0 . Podemos confirmar a

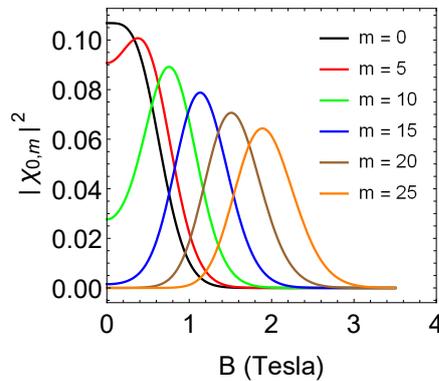


Figura 14 – Densidade de probabilidade em função do campo magnético para os estados (Eq. (5.15)) da sub-banda com $n = 0$ para $\alpha = 0.7$.

localização deste estado olhando para Fig. 8. Vemos que a curvatura aumenta o raio do

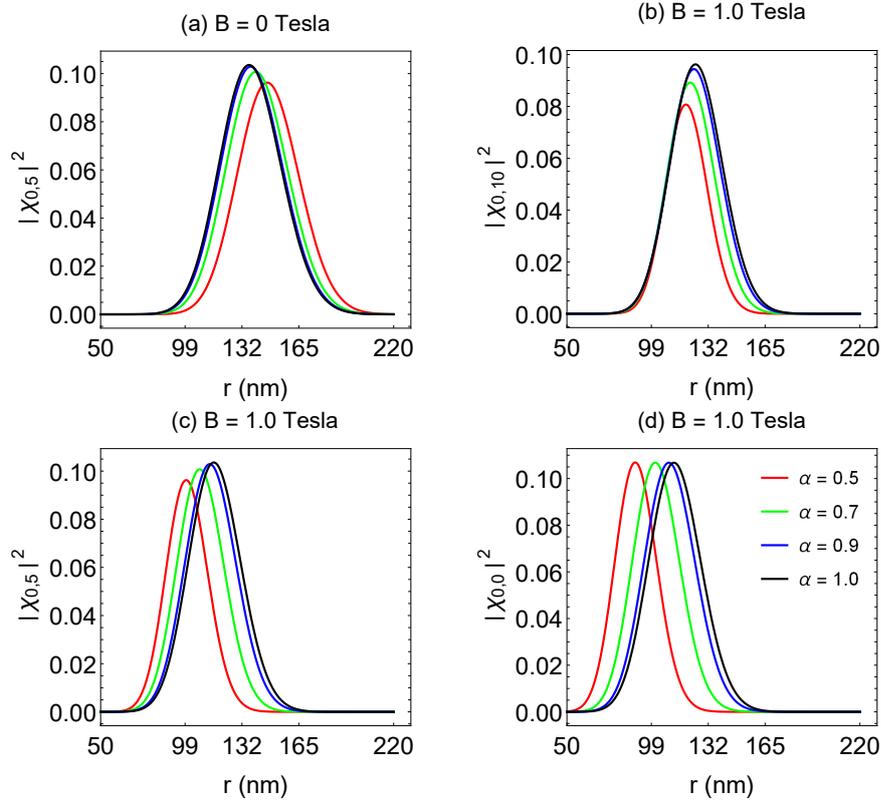


Figura 15 – Densidade de probabilidade como uma função da coordenada radial de alguns estados (Eq. (5.15)). Consideramos a sub-banda com $n = 0$ e alguns valores do parâmetro α . Em (a), mostramos o perfil da densidade de probabilidade com $m = 5$ e o campo magnético nulo. Nos painéis (b), (c) e (d), consideramos os estados com $m = 20$, $m = 5$ e $m = 0$, respectivamente, e $B = 1.0$ Tesla.

estado. Finalmente, nas Figs. 15(c)-(d), mantemos o campo magnético em $B = 1$ Tesla e consideramos os estados com $m = 5$ e $m = 0$, que estão à esquerda do mínimo das sub-bandas. Como pode ser visto, a curvatura diminui o raio do estado. Então, quando o campo magnético for zero, o raio dos estados com $m \neq 0$ aumenta à medida que o parâmetro α diminui. Contudo, quando o campo magnético for diferente de zero, os estados com $|m| > |m_0|$ têm seus raios aumentados devido aos efeitos da curvatura, enquanto os raios são diminuídos para os estados com $|m| < |m_0|$. Então, a partir desta análise e seguindo a investigação feita anteriormente sobre a energia em função do número quântico de momento angular m , concluímos que, fixando uma energia de Fermi, o número de estados diminuem devido à curvatura.

5.3 Magnetização

Nesta seção e na próxima, onde iremos tratar da corrente persistente, vamos considerar o anel bidimensional definido pela Eq. (2.3), com $a_1 = 1.8154 \times 10^9$ meV nm²

e $a_2 = 5.4654 \times 10^{-4} \text{ meV nm}^{-2}$, o qual descreve um anel mesoscópico de raio médio $r_0 = 1350 \text{ nm}$. A amostra é feita de GaAs e a massa efetiva do elétron é $\mu = 0.067 \mu_e$, onde μ_e é a massa do elétron. O dispositivo contém 1400 elétrons. Os parâmetros acima foram escolhidos por Tan e Inkson [20] para simular um anel bidimensional feito de GaAs usado no experimento realizado por Mailly, Chapelier e Benoit [30], o qual consistiu na medição da corrente persistente. Na Fig. 16, esboçamos o potencial radial (Eq. 2.3) e o potencial parabólico (Eq. 2.9) referente aos dados acima.

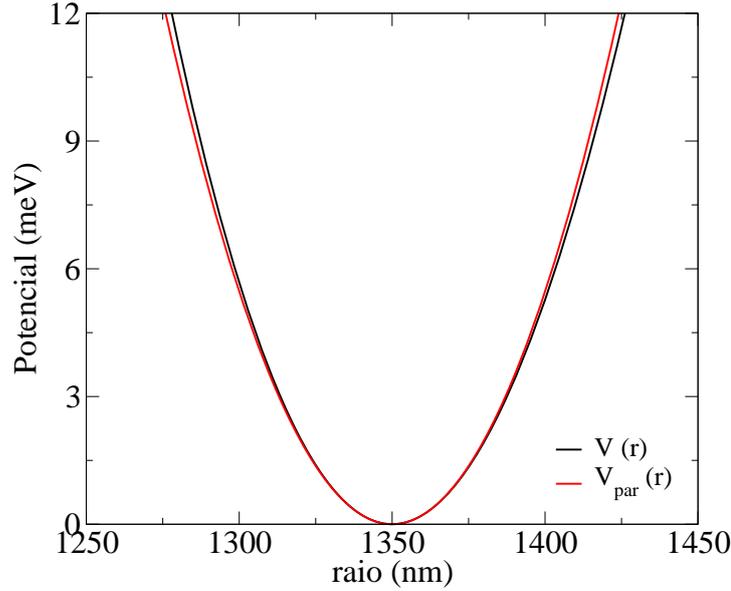


Figura 16 – Perfil do potencial radial (linha preta sólida) e do potencial parabólico (linha vermelha sólida) dados pelas Eqs. (2.3) e (2.9), respectivamente. O potencial radial descreve um anel de raio médio $r_0 = 1350 \text{ nm}$, enquanto o potencial parabólico é definido por $\hbar\omega_0 = 2.23 \text{ meV}$.

Em um anel 2D isolado, o número de elétrons é constante, o que induz uma dependência forte da energia de Fermi com relação à variação do campo magnético. O número de elétrons é calculado por

$$N = \sum_{n,m} \theta(E_F - E_{n,m}), \quad (5.21)$$

onde θ é a função degrau, E_F é a energia de Fermi e $E_{n,m}$ é a energia dos estados. A partir dessa expressão, podemos calcular a energia de Fermi de forma autoconsistente [119]. Na Fig. 17, exibimos o comportamento da energia de Fermi em função do campo magnético. As oscilações resultam da desocupação de uma sub-banda n . Como já foi mencionado acima, a curvatura aumenta a energia dos estados, resultando em um número maior de sub-bandas ocupadas e também no aumento da energia de Fermi, mas mantendo o número de elétrons constante. Além disso, observamos uma mudança nas amplitudes máximas das oscilações para campos magnéticos baixos à medida que o parâmetro α diminui. Esse resultado se deve ao comportamento das sub-bandas, como observado na Seção 5.2.

A magnetização é uma quantidade termodinâmica que surge como uma resposta da amostra ao campo magnético aplicado. Em temperaturas não nulas, a magnetização é dada por

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B} = -\sum_{n,m} M_{n,m} f_F(E_{n,m}), \quad (5.22)$$

onde F é a energia livre, $M_{n,m} \equiv -\partial E_{n,m}/\partial B$ define o momento magnético e $f_F(E_{n,m})$ é a função distribuição de Fermi-Dirac. Usando a Eq. (5.14), o momento magnético pode ser escrito explicitamente como

$$M_{n,m} = -\frac{\hbar e}{\mu\alpha^2} \left[\left(n + \frac{1}{2} + \frac{L}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega} - \frac{m-l}{2} \right]. \quad (5.23)$$

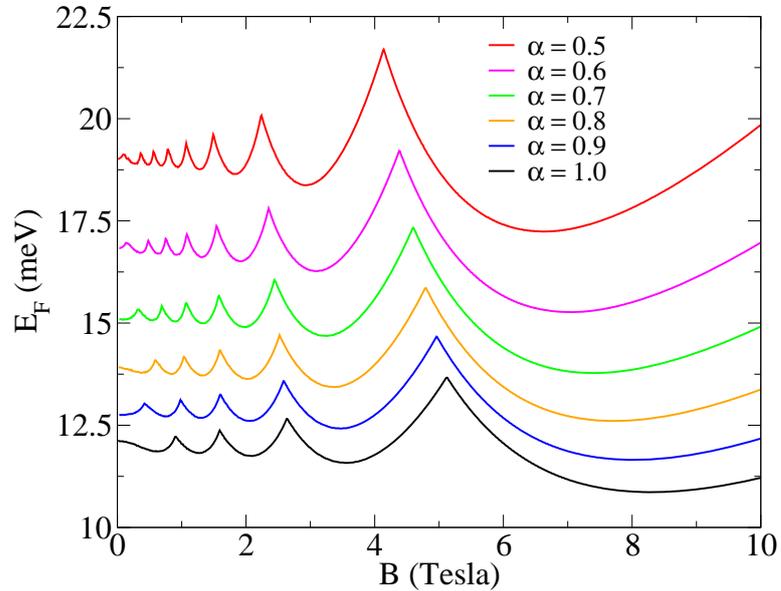


Figura 17 – A energia de Fermi a temperatura zero em função do campo magnético (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)). Quando α diminui, verifica-se um maior número de sub-bandas ocupadas e também o aumento da energia de Fermi. Além disso, há uma mudança nos máximos das oscilações.

Na Fig. 18, mostramos o comportamento da magnetização em função do campo magnético. Podemos ver claramente a presença de dois tipos de oscilações, as oscilações do tipo-AB e as oscilações do tipo-dHvA. Cada uma domina dentro de um certo intervalo de campos magnéticos. As oscilações do tipo AB são dominantes no intervalo de fracos campos magnéticos (veja a Fig. 19) e resultam do cruzamento entre os estados na energia de Fermi. Quando o campo magnético aumenta, as oscilações do tipo-dHvA tornam-se mais evidentes e correspondem às oscilações com grandes amplitudes. Essas oscilações surgem da desocupação das sub-bandas. De fato, podemos notar que as oscilações do tipo-dHvA estão associadas às oscilações observadas na energia de Fermi. Por outro lado, a amplitude das oscilações do tipo-AB diminuem com o aumento do campo magnético. Na Fig. 18, elas correspondem às rápidas oscilações de pequenas amplitudes acompanhando as

oscilações do tipo-dHvA. As oscilações do tipo-AB ainda estão presentes mesmo quando há somente uma sub-banda ocupada, como podemos ver na Fig. 20.

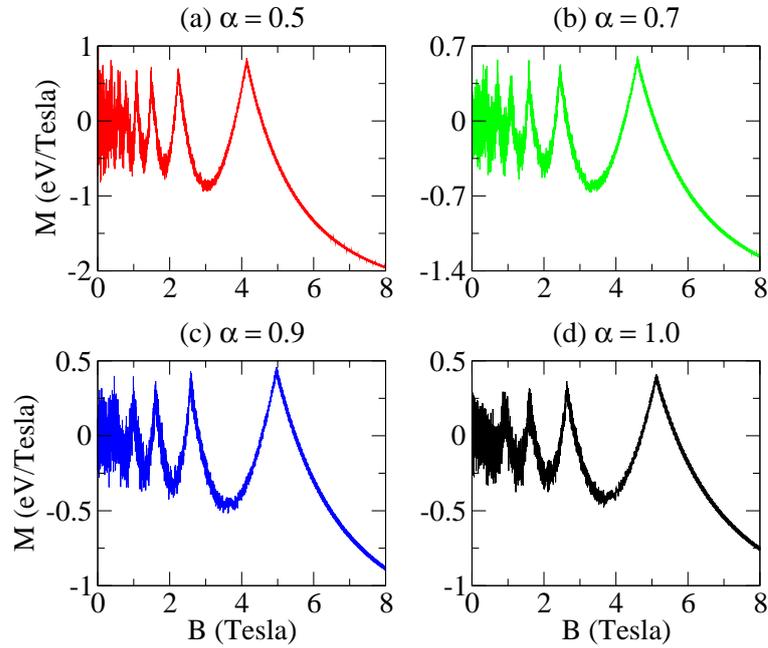


Figura 18 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), em função do campo magnético para vários valores de α . Podemos observar tanto as oscilações do tipo-AB quanto as oscilações do tipo-dHvA. A curvatura aumenta a amplitude dessas oscilações, como pode ser inferido ao comparar as diferentes escalas verticais. Além disso, observe que o máximos das oscilações do tipo-dHvA são deslocados para valores mais baixos do campo magnético quando $\alpha < 1$.

Para $\alpha < 1.0$, verificamos que a curvatura mantém os dois tipos de oscilações observadas no caso plano (caso com $\alpha = 1.0$), como podemos ver nas Figs. 18(a)-(c). Vemos que a curvatura aumenta a amplitude das oscilações, como podemos inferir a partir dos intervalos das escalas verticais nas Figs. 18, 19 e 20. Como as oscilações do tipo-dHvA têm comportamento similar àquelas observadas na energia de Fermi, então esperamos que os máximos das oscilações também sejam deslocados em campos magnéticos mais baixos e com o parâmetro α diminuindo. Isso, de fato, ocorre como mostra a Fig. 18.

Agora, mostramos a forma das oscilações da magnetização quando a temperatura é não nula. Consideramos o intervalo de campos magnéticos fracos para o caso particular quando $\alpha = 0.7$. Como podemos ver na Fig. 21, temperaturas diferentes de zero diminuem a amplitude das oscilações e tornam o comportamento de magnetização uma função suave do campo magnético.

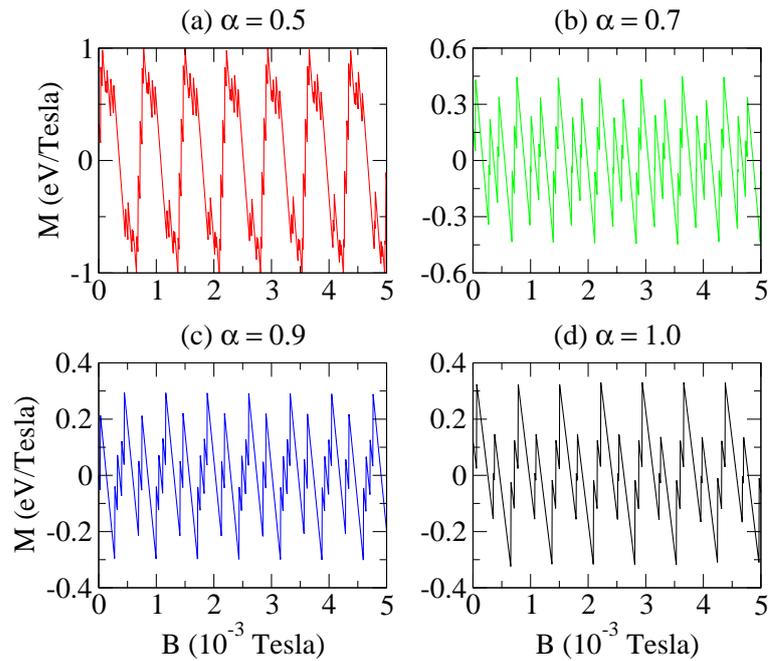


Figura 19 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), no regime de campos magnéticos fracos. As oscilações são do tipo-AB. A amplitude aumenta à medida que α diminui.

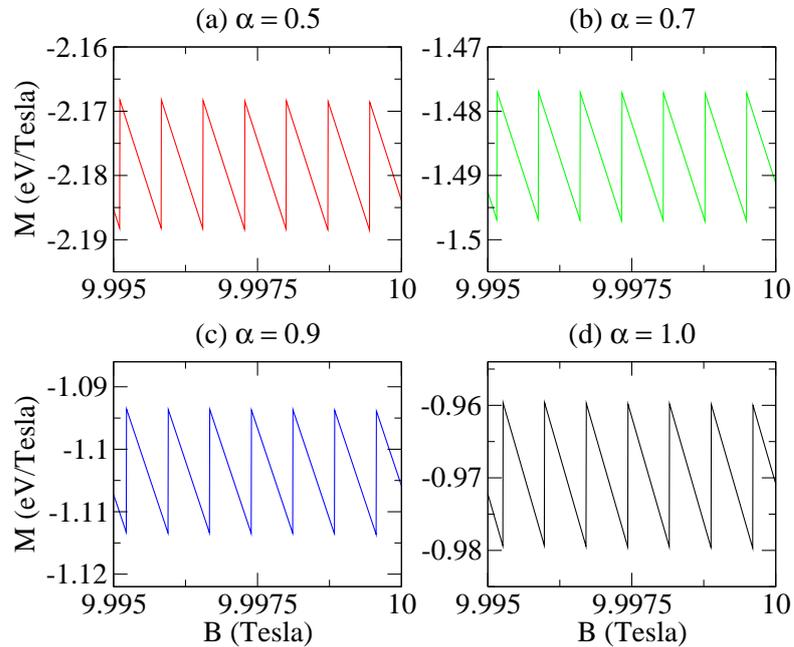


Figura 20 – A magnetização do anel quântico, dada pela Eq. (5.22), no regime de campos magnéticos fortes. As oscilações são do tipo-AB.

5.4 Corrente persistente

A energia livre de um sistema isolado permite extrair outra quantidade termodinâmica importante, a saber, a corrente persistente. Considerando a variação do fluxo

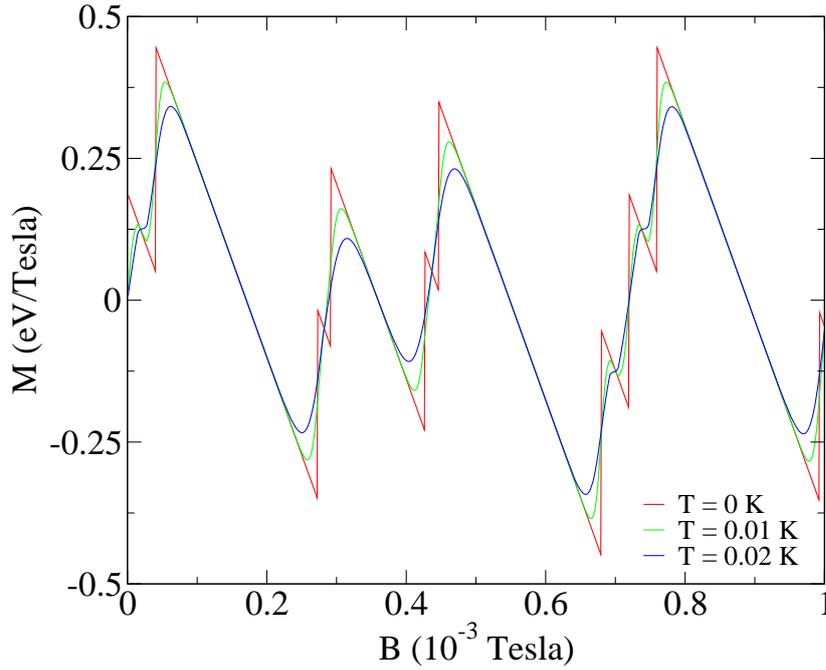


Figura 21 – O efeito da temperatura sobre as oscilações do tipo AB observadas na magnetização, a qual é dada pela Eq. (5.22). Consideramos o parâmetro $\alpha = 0.7$ e o regime de campos magnéticos fracos. O perfil revela que a magnetização é uma função suave do campo magnético para $T > 0$. A amplitude diminui à medida que a temperatura aumenta.

magnético confinado a um orifício no centro do anel, a corrente persistente é calculada usando a relação de Byers-Yang [28]. Como as energias são dadas em termos de dois parâmetros, então na Eq. (3.26), fazemos $E_n \rightarrow E_{n,m}$ e assim, obtemos

$$I_{n,m} = -\frac{\partial E_{n,m}}{\partial \Phi} = -\frac{1}{\phi_0} \frac{\partial E_{n,m}}{\partial l}, \quad (5.24)$$

onde $E_{n,m}$ é dado pela Eq. (5.14), com $\phi_0 = h/e$. A corrente total é dada por

$$I = \sum_{n,m} I_{n,m} f_F(E_{n,m}), \quad (5.25)$$

onde $I_{n,m}$ é explicitamente dado por

$$I_{n,m} = \frac{e\omega}{4\pi\alpha^2} \left(\frac{m-l}{L} - \frac{\omega_c}{\omega} \right), \quad (5.26)$$

que é a corrente persistente transportada por um dado estado $\chi_{n,m}$ do anel.

Como notado por Tan e Inkson [20], a proporcionalidade entre a corrente e o momento magnético observada no caso de um anel unidimensional é perdida em um anel bidimensional por causa da penetração do campo magnético na região condutora do anel. Na presença da curvatura, essa relação entre a corrente persistente e a magnetização é dada por

$$M_{n,m}(B) = \pi r_{n,m}^2 I_{n,m} - \frac{e\hbar}{\mu\alpha^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega_c}{\omega}. \quad (5.27)$$

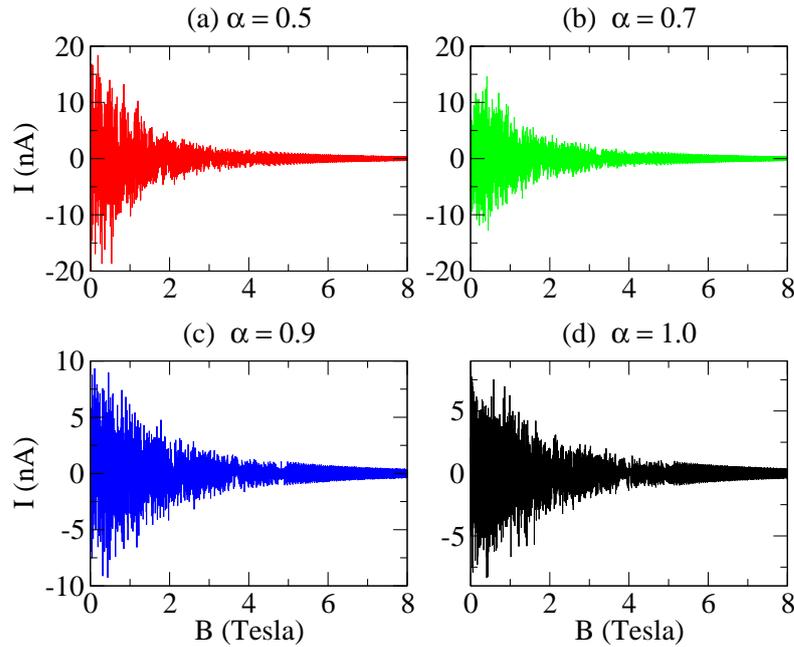


Figura 22 – Corrente persistente do anel quântico, dada pela Eq. (5.25), em função da intensidade do campo magnético. Existem apenas oscilações do tipo-AB em toda a faixa do campo magnético. Para intensidades menores de B , a amplitude inicial da corrente persistente torna-se maior.

O primeiro termo de (5.27) representa o momento magnético clássico de um anel com raio $r_{n,m}$, dado pela Eq. (5.18). O segundo termo resulta da penetração do campo magnético na região condutora do anel, sendo um termo diamagnético. Desse resultado, é possível mostrar que se $\omega_c \ll \omega_0$, a corrente persistente e a magnetização apresentam um comportamento similar, isto é, recuperamos a proporcionalidade entre essas duas propriedades físicas. Na Fig. 22, mostramos o comportamento da corrente persistente em um anel bidimensional em função do campo magnético para alguns valores do parâmetro α .

Podemos observar claramente as rápidas oscilações do tipo-AB em todo o intervalo do campo magnético considerado para diferentes valores de α . A amplitude dessas oscilações é fortemente suprimida pelo aumento do campo magnético. Comparando as escalas verticais, verificamos que para pequenos valores de α a amplitude inicial é a aumentada. Contudo, analisando as escalas horizontais, notamos que a amplitude dessas oscilações decresce mais rapidamente à medida que α diminui. Esse resultado é devido ao fato de que a curvatura aumenta os efeitos do campo magnético, como notado na Sec. 5.2.

No regime de campos magnéticos fracos (Fig. 23), as oscilações do tipo-AB são aproximadamente periódicas para todos os valores do parâmetro α considerados. Como observado na análise da Eq. (5.27), a corrente persistente é proporcional à magnetização. Isso explica o mesmo perfil das oscilações da corrente persistente e da magnetização nesse regime. Também podemos notar um aumento na amplitude da corrente persistente à medida que α diminui. Verificamos também que as oscilações do tipo-dHvA são ausentes.

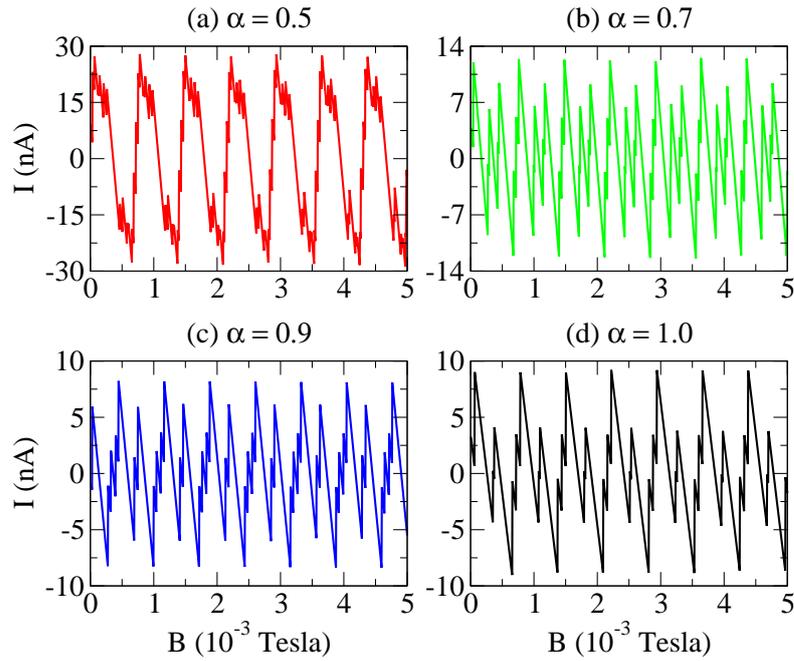


Figura 23 – Corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de campos magnéticos fracos. Seu perfil é semelhante ao da magnetização (veja o comentário depois da Eq. (5.27)). A amplitude das oscilações aumenta quando o parâmetro α diminui.

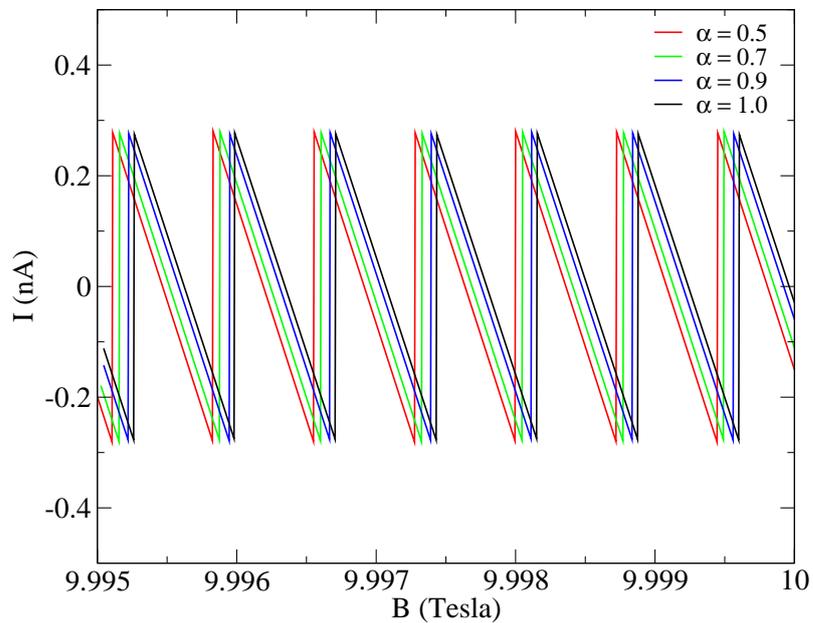


Figura 24 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de campos magnéticos fortes. A curvatura desloca o máximo das oscilações na horizontal, mas não impõe nenhum efeito sobre o máximo das amplitudes.

De fato, como o mínimo das sub-bandas muda com o campo magnético os estados ocupados são aqueles com $m > 0$.

Na Fig. 24, exibimos o comportamento da corrente persistente no regime de campos magnéticos fortes. Como podemos ver claramente, as oscilações são aproximadamente periódicas. Além disso, a curvatura desloca os máximos das oscilações, mas a amplitude das oscilações não é afetada.

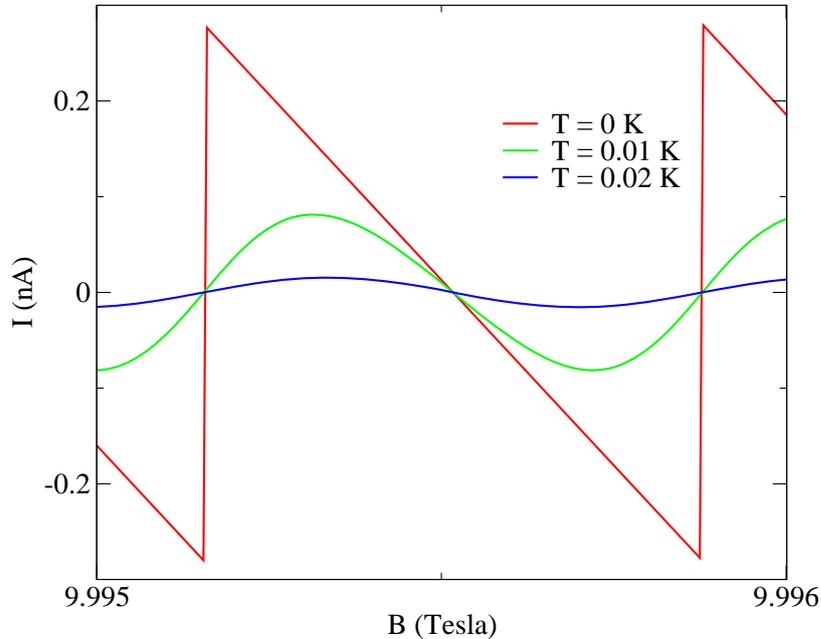


Figura 25 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), no regime de fortes campos magnéticos para $\alpha = 0.7$. A corrente persistente é uma função suave do campo magnético quando $T > 0$. A amplitude diminui à medida que a temperatura aumenta.

Na Fig. 25, mostramos a forma das oscilações da corrente persistente quando a temperatura é diferente de zero no regime de campos magnéticos fortes para o caso quando $\alpha = 0.7$. Da mesma maneira como observado na magnetização, a temperatura diminui a amplitude das oscilações e torna o comportamento da corrente persistente uma função contínua do campo magnético.

Finalmente, na Fig.26, mostramos a corrente persistente em função do número de elétrons N no regime de campo magnético fraco para $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 1.0$. Podemos notar que a corrente apresenta oscilações em módulo e sinal, como resultado da ocupação dos estados que estão à direita e à esquerda do mínimo das sub-bandas. Esse comportamento é uma consequência do modelo de potencial radial usado para descrever o anel mesoscópico. A ocupação de uma nova sub-banda ocorre sempre que aparecem dois novos ramos. Assim, podemos verificar que a ocupação dos estados eletrônicos nas sub-bandas é alterada pela curvatura. De fato, para alguns intervalos de N , o número de sub-bandas ocupadas é maior para $\alpha < 0.7$ quando comparado com o caso para $\alpha = 1.0$.

Foi verificado na Fig. 17, que a curvatura aumenta o número de sub-bandas ocupadas.

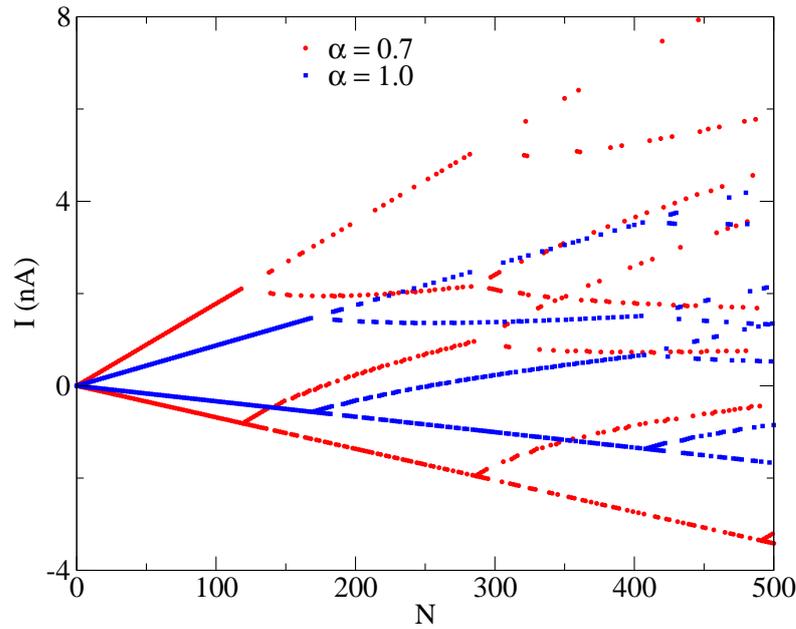


Figura 26 – A corrente persistente, dada pela Eq. (5.25), em função do número de elétron N para os parâmetros $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 1.0$. Consideramos $B = 1 \times 10^{-4}$ Tesla. Quando dois novos ramos aparecem, outra sub-banda passa a ser ocupada. O número de sub-bandas ocupadas, para $\alpha = 0.7$ e $\alpha = 1.0$ é diferente em alguns intervalos de N .

Podemos observar que esse efeito ocorre no intervalo de campos magnéticos menores que 2 T. Isso deve modificar o padrão de batimentos originado da superposição entre as oscilações do tipo-AB e do tipo-dHvA no intervalo de campos magnéticos fracos na magnetização, visto que o aumento de sub-bandas ocupadas aumenta o número de oscilações do tipo-dHvA. Esse resultado foi abordado por Tan e Inkson [20] de um outro ponto de vista. Lá, os autores estudaram anéis com larguras diferentes. O número de elétrons era o mesmo nos dois modelos, porém, o número de sub-bandas ocupadas não. A diferença no número de sub-bandas ocupadas entre os dois modelos resultou em comportamentos diferentes nas oscilações da magnetização. No nosso caso, esse resultado não pode ser verificado diretamente na Fig. 19, pois seria necessário um maior número de sub-bandas ocupadas [20]. Na corrente persistente, Tan e Inkson também verificaram resultados semelhantes, embora, neste caso, as oscilações do tipo-dHvA estejam ausentes [20].

6 Efeitos de curvatura na energia dos estados, na magnetização e corrente persistente de pontos quânticos

Agora vamos tratar dos efeitos da curvatura em algumas propriedades físicas de pontos quânticos. Pontos quânticos são estruturas simplesmente conexas, isto é, não apresentam buracos. A exemplo do anel quântico, pontos quânticos quando imersos em campos eletromagnéticos externos apresentam uma vasta gama de fenômenos físicos. Aqui, novamente, estamos interessados em compreender como a curvatura modifica as propriedades físicas desses dispositivos quando submetidos a campos magnéticos externos, como por exemplo, a magnetização e a corrente persistente. Diferente do que ocorre no anel, a influência do potencial geométrico têm efeitos significantes nas propriedades de um ponto quântico. Isso fica mais evidente quando olhamos para a potencial geométrico (veja a Eq. 4.32). De fato, quanto mais próximo da origem, mais a curvatura média aumenta de intensidade. Além disso, temos uma singularidade em $r = 0$, devido à curvatura Gaussiana. Assim, uma vez que estamos tratando de uma geometria simplesmente conexa, é de se supor que a presença do potencial geométrico modifique o comportamento das propriedades do ponto quântico. Como a singularidade não pode ser evitada, devemos usar o método de extensão auto-adjunta para obtermos as energias do sistema. Nesta tese, não mostramos os detalhes matemáticos sobre esse método. Ao longo deste capítulo, mencionamos algumas boas referências onde leitor poderá buscar um melhor aprofundamento da matemática envolvida no método. Assim, usamos apenas resultados já conhecidos na literatura que nos permitem obter as energias. A partir daí, podemos estudar como a curvatura afeta as propriedades eletrônicas, magnetização e também a corrente persistente de pontos quânticos. Os resultados apresentados em seguida resultaram no artigo intitulado “Modifications of Electron States, Magnetization, and Persistent Current in a Quantum Dot by Controlled Curvature” [106].

6.1 Autofunções e os autovalores de energia de um ponto quântico

Novamente, partimos da equação de Schrödinger que descreve o movimento de uma partícula carregada vinculada a uma superfície curva sujeita a campos magnéticos externos e com um potencial radial que limita o movimento da partícula em uma região limitada da superfície curva (Eq. (5.4))

$$H\chi_S(r, \varphi) = E\chi_S(r, \varphi), \quad (6.1)$$

onde o Hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\alpha^2 r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - il \right)^2 + \frac{ieB}{\hbar\alpha^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - il \right) + \frac{e^2 B^2 r^2}{4\hbar^2 \alpha^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{(1-\alpha^2)}{4\alpha^2 r^2} - \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \right) \frac{\delta(r)}{r} \right] + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0. \quad (6.2)$$

Como estamos tratando de um ponto quântico, então deveríamos considerar o parâmetro $a_1 = 0$ no potencial radial, como foi observado na Sec. 2. Contudo, estamos seguindo o procedimento da Ref. [20], na qual a expressão da corrente persistente de um estado do ponto quântico é derivada dos resultados obtidos no modelo de anel. Sendo assim, seguiremos com o parâmetro a_1 não nulo, como se o modelo fosse de um anel. Nesse caso, todos os resultados obtidos entre as Eqs. (5.5) e (5.11) permanecem válidos aqui.

Novamente, temos a presença do potencial tipo δ . No caso do anel, foi possível evitar o potencial função δ . No caso do ponto quântico, a região $r = 0$ é uma região acessível para a partícula. Nesse sentido, uma vez que o potencial tipo δ é singular justamente nesse ponto, os elétrons interagem com esse potencial. Como mencionado acima, uma maneira de solucionar esse problema é usar o método de extensão auto-adjunta de operadores em mecânica quântica. A receita para tratar ambos os problemas de espalhamento e estados ligados no contexto da mecânica quântica não relativística pode ser encontrada na Ref. [159] ou alternativamente na Ref. [154]. Nessas duas referências a função δ aparece por causa do acoplamento entre o campo magnético e o spin da partícula¹. Uma vez que o campo magnético é dado pela Eq. (5.2), então aparece um potencial tipo δ na equação de movimento, de natureza diferente do que ocorre na Eq. (5.7). De fato, um tem natureza geométrica enquanto o outro resulta da circulação do potencial vetor. Portanto, seguindo as Refs. [159, 154], obtemos os autovalores de energia e as autofunções da Eq. (6.1) dados, respectivamente, por

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{L}{2} \right) \hbar\omega - \frac{(m-l)}{2\alpha^2} \hbar\omega_c - \frac{\mu\omega_0^2 r_0^2}{4}, \quad (6.3)$$

e

$$\chi_S(r, \varphi) = \left(\frac{1}{2\lambda^2} \right)^{\frac{1+L}{2}} e^{im\varphi} e^{-\frac{r^2}{4\lambda^2}} r^L \times \left[c_1 M \left(\frac{1+L+\lambda^2\kappa'^2}{2}, 1+L, \frac{r^2}{2\lambda^2} \right) + c_2 U \left(\frac{1+L+\lambda^2\kappa'^2}{2}, 1+L, \frac{r^2}{2\lambda^2} \right) \right], \quad (6.4)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, M e U denotam as funções hipergeométricas de primeiro e segundo tipo, respectivamente [160], c_i ($i = 1, 2$) são constantes, L e λ são dados

¹ Esse acoplamento dá origem a um termo tipo Zeeman. Na literatura, o efeito Zeeman é o desdobramento das raiais espectrais de um espectro em resposta à aplicação de um campo magnético a uma amostra.

pelos Eqs. (5.9) e (5.10) respectivamente, enquanto que o parâmetro $\kappa' = \kappa + 2\mu E/\hbar^2$ onde κ é dado pela Eq. (5.8). O sinal $+$ ($-$) na Eq. (6.3) refere-se à energia correspondente à solução regular (irregular) da função de onda na origem. O momento angular efetivo, dado pela Eq. (5.9), revela quando o Hamiltoniano é auto-adjunto: se $|L| \geq 1$ ele é auto-adjunto e se $|L| < 1$ ele não é auto-adjunto. Para mais detalhes sobre esse assunto veja as Refs. [154, 155].

6.2 Análise dos estados eletrônicos de um ponto quântico

Nesta seção, investigamos o espectro de energia do ponto quântico descrito na seção anterior. Como já mencionado antes, o ponto quântico é obtido fazendo o parâmetro $a_1 = 0$ no potencial radial, levando ao caso particular onde $V(r) = a_2 r^2$. Como uma consequência desse resultado, encontramos $r_0 = 0$ e $a_2 = \mu\omega_0^2/8$. Para as análises numéricas, assumimos $\hbar\omega_0 = 0.459$ meV e que a estrutura é feita de GaAs com a massa efetiva do elétron dada por $\mu = 0.067m_e$.

Retornando à Eq. (5.9), uma análise mostra que o estado com $m = l$ não é um estado permitido para o ponto quântico, pois resulta em um autovalor de energia complexo. Além disso, estamos interessados somente nos efeitos do campo magnético uniforme, de modo que podemos negligenciar o tubo de fluxo de AB fazendo $l = 0$ nos resultados. Nesse caso, o estado não permitido é justamente o estado com $m = 0$, o que leva a $|L| > 1$, independente do valor do parâmetro α . Esse estado, contudo, é o único estado irregular como pode ser observado ao fazermos $m = l = 0$ na Eq. (5.9) e levando em conta o intervalo $|L| < 1$. Portanto, o Hamiltoniano é auto-adjunto para todos os outros possíveis valores de m e somente os autovalores de energia da solução regular necessitam ser consideradas. Podemos concluir, dessa forma, que a curvatura Gaussiana não modifica os estados do ponto quântico; a curvatura média elimina o único estado que satisfaz a exigência $|L| < 1$.

Podemos imediatamente verificar que a Eq. (6.3) dá os autovalores de energia para um ponto quântico em uma amostra plana considerando $\alpha = 1$ [25, 27, 121, 158, 161, 26]. Na ausência de campos magnéticos externos, podemos verificar que a separação entre sub-bandas adjacentes é $\hbar\omega_0$ e não é influenciada pela curvatura da superfície. Por outro lado, na presença de campo magnético externo uniforme, ressaltamos duas consequências: (i) a separação entre sub-bandas vizinhas é $\hbar\omega$, e depende do campo magnético e do parâmetro α por meio da Eq. (5.11); (ii) as energias dos estados com $m > 0$ são menores que as energias dos estados com $m < 0$. A situação (i) implica que o aumento do campo magnético e ou a diminuição do parâmetro α resultam em um maior distanciamento entre as sub-bandas vizinhas, enquanto que a situação (ii) revela que os elétrons tendem a preencher os estados $m < 0$ de energias mais baixas.

Na literatura, é comum investigar o aparecimento de degenerescência nos estados

de um ponto quântico. No caso de um ponto quântico em uma amostra plana na ausência de campo magnético externo, todos os estados são degenerados exceto o estado $m = 0$: os estados com energias $E_{0,-1}$ e $E_{0,1}$ formam uma “casca”, a qual é duplamente degenerada; os estados $E_{0,-2}$, $E_{0,2}$ e $E_{1,0}$ formam uma segunda “casca”, a qual é triplamente degenerada; e assim por diante. Implicações físicas adicionais podem ocorrer, como por exemplo, se considerarmos o spin do elétron, leva ao aparecimento dos números mágicos $N = 2, 6, 12, 20, \dots$ [158, 26]. A degenerescência em relação aos números quânticos angulares m e $-m$ surge da simetria rotacional presente no modelo de potencial de confinamento, enquanto que as degenerescências adicionais, como por exemplo, os estados $E_{0,-2} = E_{0,2} = E_{1,0}$, estão associados com a harmonicidade do potencial de confinamento [26]. Na presença de um campo magnético, porém, a degenerescência é eliminada no regime de campos magnéticos fracos, mas quando o campo magnético é aumentado, degenerescências acidentais podem ocorrer, levando novamente a um maior agrupamento de níveis de partícula única [161]. No caso de um ponto quântico em uma amostra curva na ausência de um campo magnético, as energias são dadas por

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{L}{2} \right) \hbar\omega_0. \quad (6.5)$$

É fácil perceber que a simetria rotacional no confinamento lateral é preservada, mas a degenerescência em relação à harmonicidade do potencial de confinamento é quebrada. Esse resultado é uma consequência da presença da curvatura média e também do parâmetro de curvatura α presentes em L (Eq. (5.9)). Portanto, a degenerescência é reduzida significativamente. Por outro lado, com a presença do campo magnético, o perfil da degenerescência muda quando o campo magnético varia. Em outras palavras, podemos ter um aumento ou diminuição de cruzamento entre os níveis dependendo da intensidade do campo magnético; a degenerescência se torna mais complexa quando comparada com o caso da amostra plana. Em outras palavras, uma comparação direta não seria tão simples para ser realizada. No limite quando o confinamento tende a zero, $\omega_0 \rightarrow 0$, ou, o que é equivalente a impor que $\omega_c \gg \omega_0$, obtemos as energias $E_{nm} = (N + 1/2) \hbar\omega_c/\alpha$, com $N = n + (L - m/\alpha)/2$. Note que, para $\alpha = 1$, os níveis de Landau são recuperados [27]. Para $\alpha < 1$, a curvatura remove a degenerescência dos níveis de Landau. Na Fig. 27, plotamos as energias de um ponto quântico em função do número quântico m para três valores diferentes de α e dois valores de campo magnético. Os círculos e quadrados representam as energias, enquanto que as linhas sólidas indicam as sub-bandas. Para $B = 0$, podemos ver que a curva das sub-bandas mostra um aspecto em forma de V sendo mais “fechados” quando há curvatura e mais “abertos” quando não há, ou seja, a energia de um estado (n, m) de um elétron é maior em um ponto quântico em uma amostra curva do que em uma amostra plana. Os estados de um elétron em um ponto quântico de uma amostra plana são degenerados devido as simetrias rotacional e de harmonicidade, enquanto que para o caso curvo, a degenerescência é somente devido à simetria rotacional.

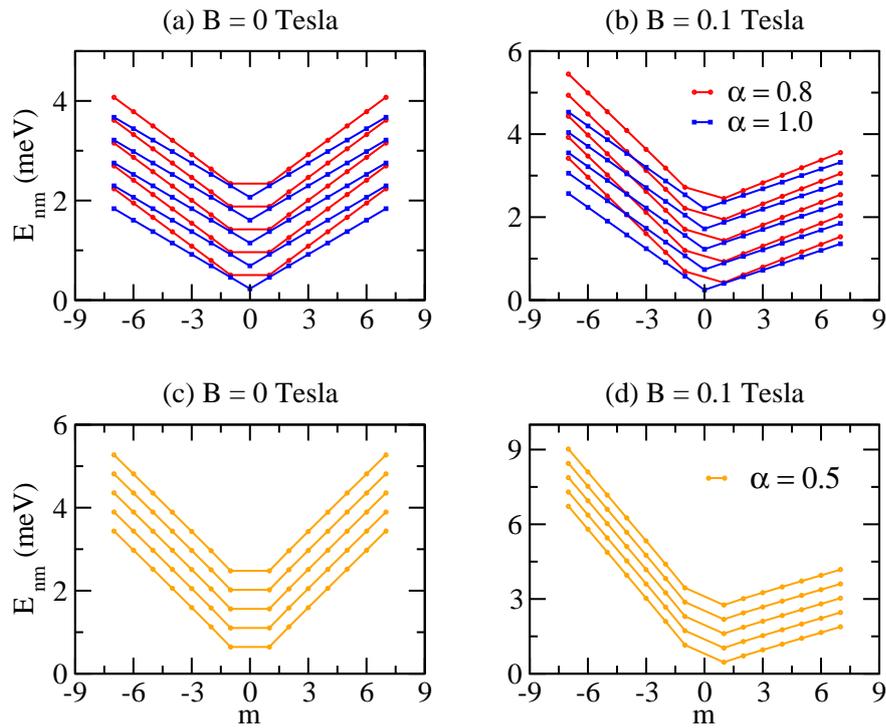


Figura 27 – Níveis de energia de um ponto quântico, dados pela Eq. (6.3), em função do número quântico m no regime de campos magnéticos fracos. Consideramos as cinco primeiras sub-bandas ($n = 0, 1, 2, 3, 4$). Em (a) e (b) temos o caso em que $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 1.0$, respectivamente. Em (c) e (d), usamos $\alpha = 0.5$.

Podemos ver na Fig. 27(c) que para $\alpha = 0.5$ a curvatura causa um pequeno desvio nas energias dos estados mais baixos removendo, assim, a degenerescência devido à harmonicidade. Para os estados mais altos, o desvio nas energias é bem maior. A presença de um campo magnético quebra a simetria rotacional e as sub-bandas tendem a sofrer uma rotação no sentido horário, de modo que mais elétrons passam a ocupar os estados de energia positiva (veja as Figs. 27(b)-(d)). Esse efeito é independente da presença da curvatura.

Na Fig. 28, mostramos os níveis de energia em função do campo magnético para $\alpha = 0.3$, $\alpha = 0.5$, $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 1.0$. Também plotamos a energia de Fermi correspondente ao caso particular onde existem 20 elétrons confinados em um ponto quântico. Na Fig. 28(d), é possível ver que quando o campo magnético $B \rightarrow 0$, o espectro de energia de um ponto quântico é não degenerado. Contudo, ao aumentar a intensidade do campo magnético, a degenerescência reaparece, e para alguns valores de B , ela pode ser bastante elevada. Nas Figs. 28(a)-(c), podemos ver claramente que o padrão de cruzamento entre os níveis de energia é afetado pela curvatura. Também podemos observar que as energias dos estados com $m < 0$ são mais impactadas pela curvatura, como por exemplo, o caso do estado com energia $E_{0,-1}$, representado pela linha tracejada. O perfil dos estados com $m < 0$ tem efeitos importantes na corrente persistente. Um efeito notável que podemos ver na

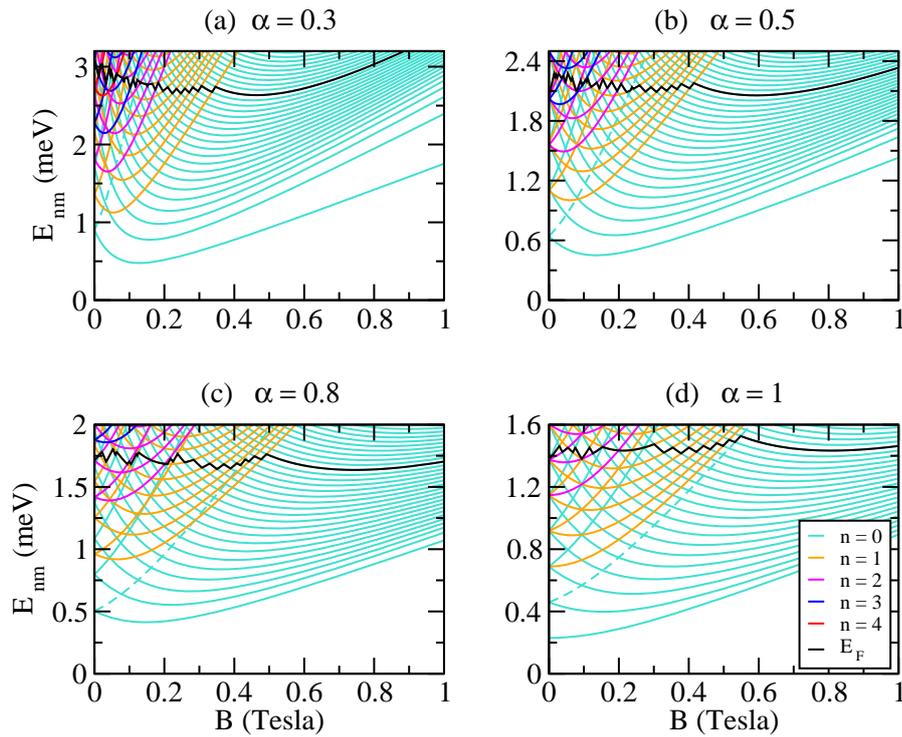


Figura 28 – Níveis de energia de um ponto quântico, dados pela Eq. (6.3), em função do campo magnético. As linhas pretas representam o comportamento da energia de Fermi para o caso em que há 20 elétrons na amostra. As linhas tracejadas correspondem ao estado de energia $E_{0,-1}$.

Fig. 28 é que o número de sub-bandas ocupadas na energia de Fermi é maior na presença de curvatura, mesmo com a sub-banda sendo desocupada mais rapidamente.

6.3 Magnetização em pontos quânticos

Iniciamos esta seção estudando a energia de Fermi de um ponto quântico uma amostra curva discutido na seção anterior. Nesta e nas duas seções seguintes vamos considerar uma amostra contendo 1400 elétrons sem spin. Na Fig. 29, mostramos o comportamento da energia de Fermi como uma função do campo magnético para alguns valores de α . Como no caso do anel, usamos a Eq. (5.21) para calcular a energia de Fermi de forma autoconsistente. Podemos observar que a energia de Fermi exibe um comportamento não trivial e não-suave quando o campo magnético é variado. No regime de campos magnéticos fracos, a energia de Fermi exibe um desvio para baixo para $\alpha < 1$. Isso é uma consequência direta da ausência do estado com $m = 0$, o qual implica em uma mudança na ocupação dos estados; a energia mínima é deslocada para o estado seguinte. Um campo magnético não nulo faz com que o estado mais baixo atinja uma energia mínima, como podemos ver na Fig. 28(a)-(c). Uma vez que esse valor mínimo tenha sido atingido, a ausência do estado com $m = 0$ tem um efeito menor sobre a ocupação dos

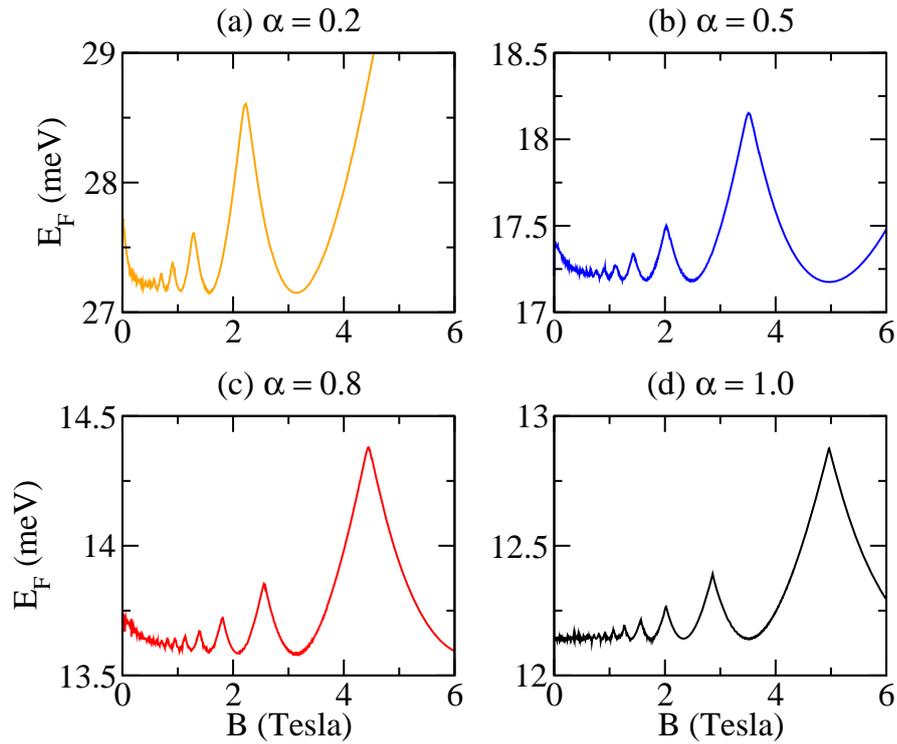


Figura 29 – Energia de Fermi na temperatura zero (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em um ponto quântico em função do campo magnético.

estados. Por se tratar de comportamento eletrônico, tanto a corrente persistente quanto a magnetização também terão um resultado anômalo no regime de campos magnéticos fracos.

Para analisar a magnetização em um ponto quântico (com $a_1 = 0$), as expressões dadas pelas Eqs. (5.22) e (5.23) permanecem válidas. Contudo, consideramos somente o caso de temperatura nula, de modo que a função distribuição de Fermi-Dirac $f(E)$ assume o valor 1.

Na Fig. 30, mostramos o perfil da magnetização em função do campo magnético para diferentes valores de α . Podemos ver que perfil das oscilações muda com o aumento da intensidade do campo magnético. No caso plano, a magnetização apresenta as oscilações do tipo AB e dHvA. As oscilações do tipo AB são devido a redistribuição dos estados eletrônicos na energia de Fermi e são dominantes no regime de campos magnéticos fracos, como podemos verificar na Fig. 31. As oscilações do tipo dHvA tornam-se dominantes sobre as oscilações do tipo AB à medida que o campo magnético aumenta. Isso também é mostrado na Fig. 30 e elas são um resultado da depopulação das sub-bandas². Quando somente uma sub-banda é ocupada na energia de Fermi, as oscilações do tipo AB são ausentes (veja a Fig. 31). Para fins de comparação, podemos notar na Figura 28 que não

² Observe que o comportamento dessas oscilações é semelhante ao caso estudado na magnetização de anéis na Seç. (5.3).

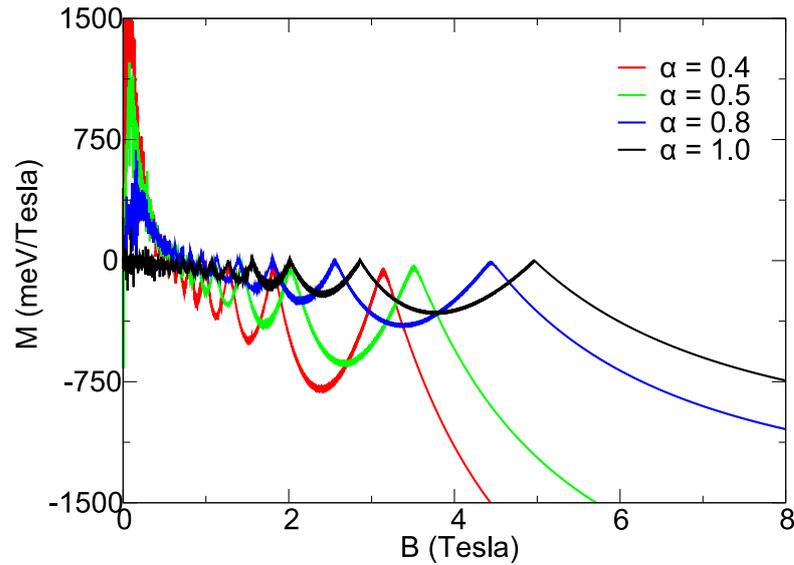


Figura 30 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), em função do campo magnético.

há mais estados se cruzando na energia de Fermi e, portanto, não há mais oscilações do tipo AB.

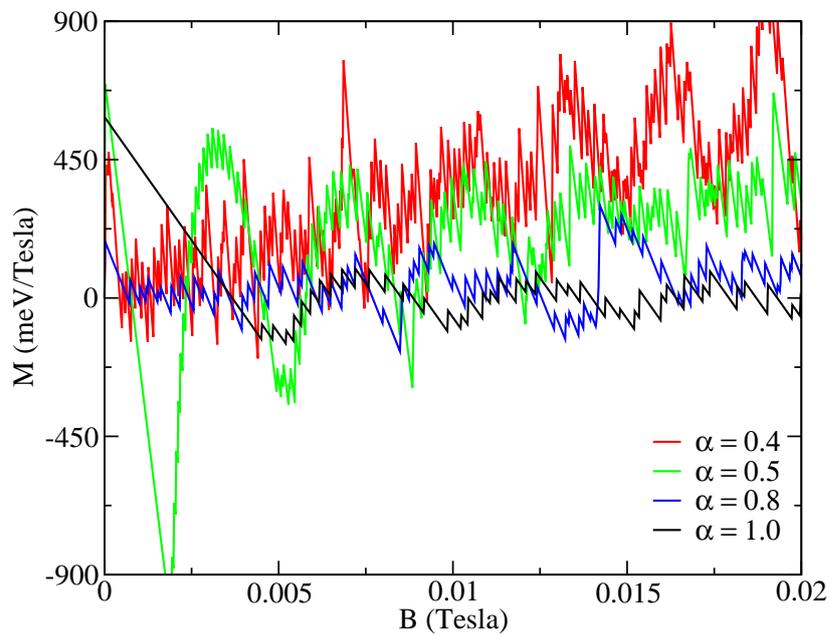


Figura 31 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), no intervalo de campos magnéticos fracos.

Para um ponto quântico em uma superfície curva, podemos também ver um complexo padrão de oscilação. Como discutido acima, os efeitos da curvatura tendem a diminuir a degenerescência, a qual resulta diretamente no anulamento da magnetização em $B = 0$, uma vez que há um número par de elétrons. As oscilações do tipo AB estão

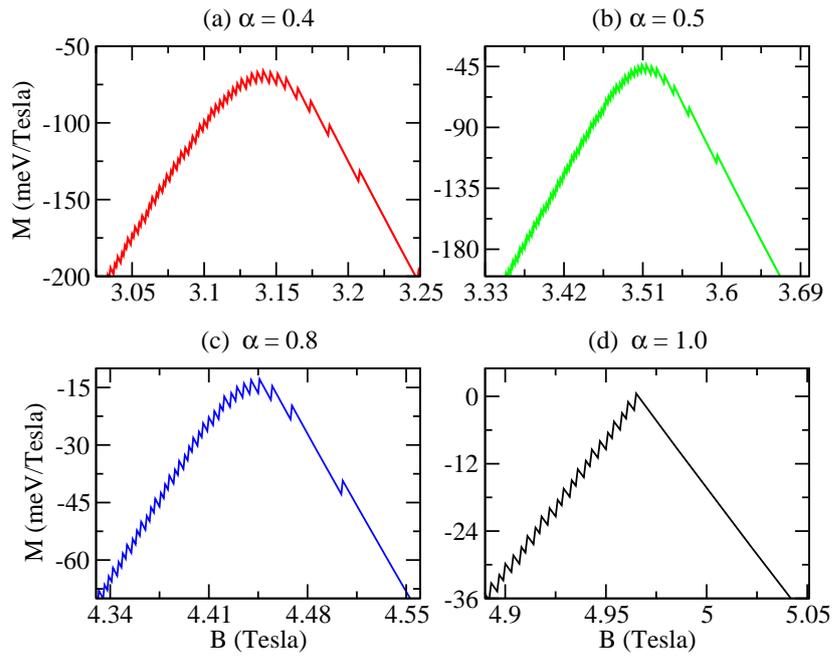


Figura 32 – Magnetização em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), quando a sub-banda com $n = 1$ é despovoada.

presentes, como podemos ver na Fig. 31. Se apenas uma sub-banda é ocupada na energia de Fermi, as oscilações do tipo AB são ausentes (veja Fig. 32(a)-(c)). Oscilações com grandes amplitudes, as quais surgem com o aumento da intensidade do campo magnético, não necessariamente configuram oscilações do tipo dHvA. Isso também pode ser observado na Fig. 32(a)-(c), onde vemos que o pico das oscilações não coincidem com a desocupação da sub-banda com $n = 1$. Além disso, no intervalo onde o confinamento lateral é dominante, vemos que junto com as oscilações do tipo AB, a magnetização apresenta um pico. Esse

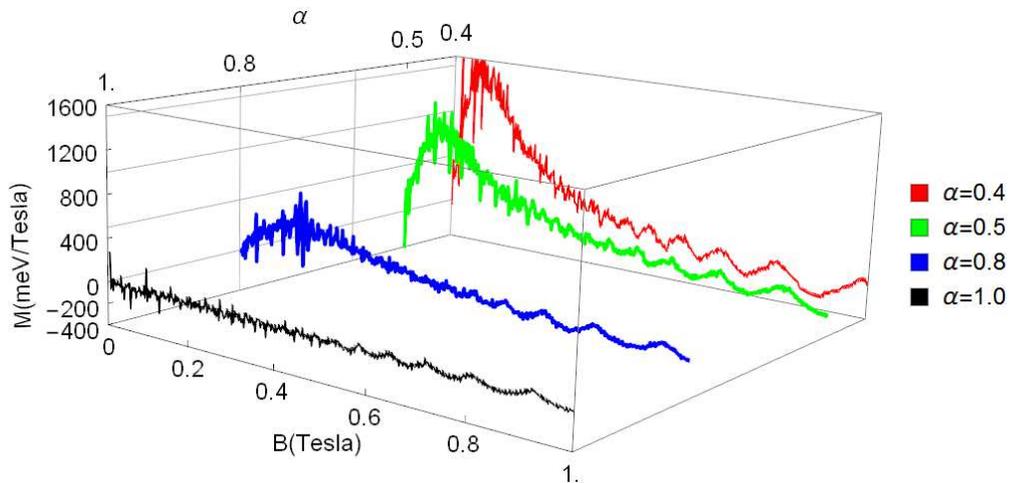


Figura 33 – Magnetização de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.22), como uma função do campo magnético. A amplitude das oscilações do tipo AB depende do parâmetro α .

comportamento é devido ao fato de que o estado com $m = 0$ não é um estado permitido. A Fig. 33 mostra mais claramente a região onde as oscilações do tipo AB são dominantes. Com o aumento do campo magnético, vemos ainda as oscilações do tipo AB, mas com amplitudes menores.

6.4 Corrente persistente em pontos quânticos

Nesta seção, estudamos a origem e o comportamento de corrente persistente em um ponto quântico. A exemplo do que ocorreu na magnetização em um anel quântico, cujos os resultados também são válidos para um ponto quântico (com $a_1 = 0$), o mesmo se aplica para o caso da corrente persistente, ou seja, os resultados expressos pelas Eqs. (5.25) e (5.26) permanecem válidos³. Contudo, há um sutileza. A corrente persistente em um anel quântico foi calculada usando a relação de Byers-Yang (Eq. 3.26). Essa relação pode ser usada, contanto que a função de onda $\chi_{n,m}$ seja zero na região $r = 0$. Em outras palavras, o modelo deve ser simplesmente não conexo. No caso do ponto quântico, obviamente, devemos tomar cuidado ao usar essa relação, visto que o modelo corresponde a um sistema simplesmente conexo. De fato, para $\alpha = 1$, foi mostrado na Ref. [20] que para o estado com $m = l$, a função de onda é não nula em $r = 0$ e a relação de Byers-Yang não mais se aplica. Contudo, usando um apropriado limite, Tan e Inkson [20] calcularam a corrente persistente transportada por esse estado em um ponto quântico. De fato, fazendo $\alpha = 1$ na Eq. (5.25), temos

$$I_{n,m=l} = \lim_{a_1 \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow l} \frac{e\omega}{4\pi} \left(\frac{m-l}{L} - \frac{\omega_c}{\omega} \right) = -\frac{e\omega_c}{4\pi}, \quad (6.6)$$

que é a corrente transportada pelo estado $m = l$ de um ponto quântico [23, 20]. Em nosso caso, podemos reescrever o resultado acima como

$$I_{n,m=l} = \lim_{a_1 \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow l} \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{e\omega}{4\pi\alpha^2} \left(\frac{m-l}{L} - \frac{\omega_c}{\omega} \right) = -\frac{e\omega_c}{4\pi}, \quad (6.7)$$

e assim, recuperamos a corrente obtida nas Refs. [23, 20] para o estado com $m - l = 0$. Para $\alpha \neq 1$, no entanto, o estado $m = l$ não representa um problema, visto que ele não é um estado permitido.

A corrente persistente em função do campo magnético é plotada na Fig. 34 para diferentes valores de α . Em uma superfície plana, os níveis de energia de um ponto quântico, quando o campo magnético é zero, são fortemente degenerados, como foi mencionado acima. Essa característica dos níveis de energia de um ponto quântico influencia o comportamento da corrente persistente quando o campo magnético é zero. De fato, note que um valor não nulo da corrente persistente em $B = 0$ (Fig. 35) torna claro que a "casca" mais

³ Continuamos considerando somente o caso de temperatura nula. Assim, a função distribuição de Fermi $f(E)$ na Eq. (5.25) assume o valor 1.

externa ocupada não é totalmente preenchida. Um campo magnético não nulo redistribui os estados, de modo que mais estados com $m > 0$ são ocupados na energia de Fermi. Essa

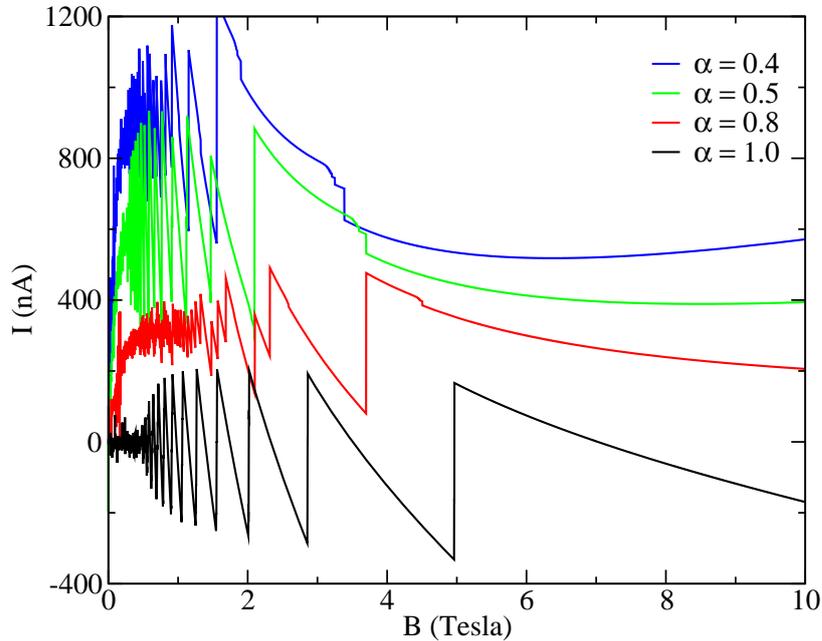


Figura 34 – Corrente persistente de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), em função do campo magnético.

redistribuição dos estados origina as oscilações do tipo AB (Fig. 35). Contudo, aumentado a intensidade do campo magnético, as oscilações do tipo dHvA tornam-se mais evidentes, como mostra as Figs. 34 e 36. Observa-se que a corrente transportada por um estado com $m \leq 0$ é maior do que a corrente transportada por um estado com $m > 0$. Além disso, as energias dos estados com $m \leq 0$ estão sempre próximas ao fundo de uma sub-banda (veja, por exemplo, a Fig. 28(d)) no intervalo de campos magnéticos fortes. Portanto, quando o fundo da sub-banda cruza a energia de Fermi, ocorre a desocupação dos estados com $m \leq 0$ e, conseqüentemente, resulta em uma mudança abrupta na corrente persistente [20].

Vamos agora analisar o ponto quântico quando ele está em uma amostra curva. Vimos acima que os estados de um ponto quântico quando $B = 0$ são duplamente degenerados devido à simetria rotacional. Por causa disso, a corrente é nula. Um campo magnético fraco quebra a simetria rotacional e a corrente passa a exibir as oscilações do tipo AB, como visto na Fig. 35. Podemos também observar que no intervalo de campos magnéticos fracos há um aumento da corrente persistente por causa da ausência do estado com $m = 0$. Quando o campo magnético aumenta, as oscilações que são observadas não se configuram, necessariamente, como oscilações do tipo dHvA. Da análise da corrente persistente em uma amostra plana, sabemos que os estados com $m \leq 0$ têm grande importância para o perfil das oscilações. No caso da amostra curva, o estado com $m = 0$ não é permitido. Então, as oscilações que observamos resultam somente da desocupação dos

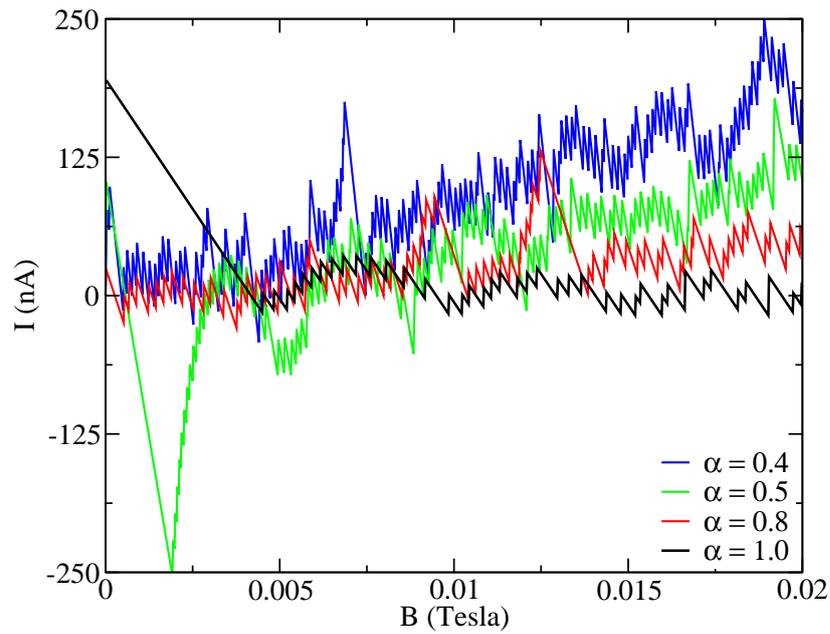


Figura 35 – Corrente persistente em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), no regime de campo magnético fraco.

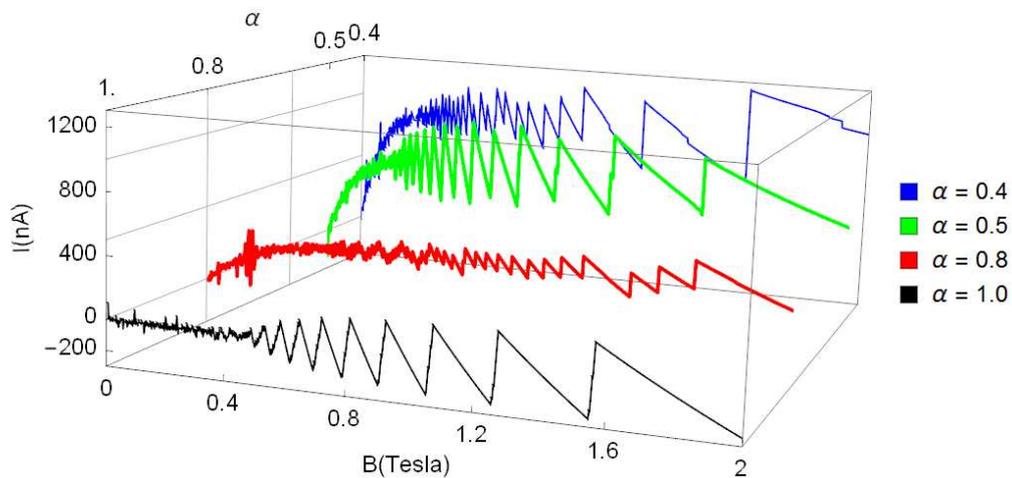


Figura 36 – Visualização tridimensional da corrente persistente de um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), em função do campo magnético

estados com $m < 0$. Como observado na Fig. 29, os estados com $m < 0$ são mais afetados pela curvatura, de modo que esperamos que as oscilações tenham um comportamento diferente daquele que observamos em uma amostra plana. Na Fig. 37(a)-(c), podemos observar mais claramente que mudanças abruptas ocorrem com o despovoamento de um estado com $m < 0$. Contudo, esses estados não estão necessariamente próximos ao fundo de uma sub-banda.

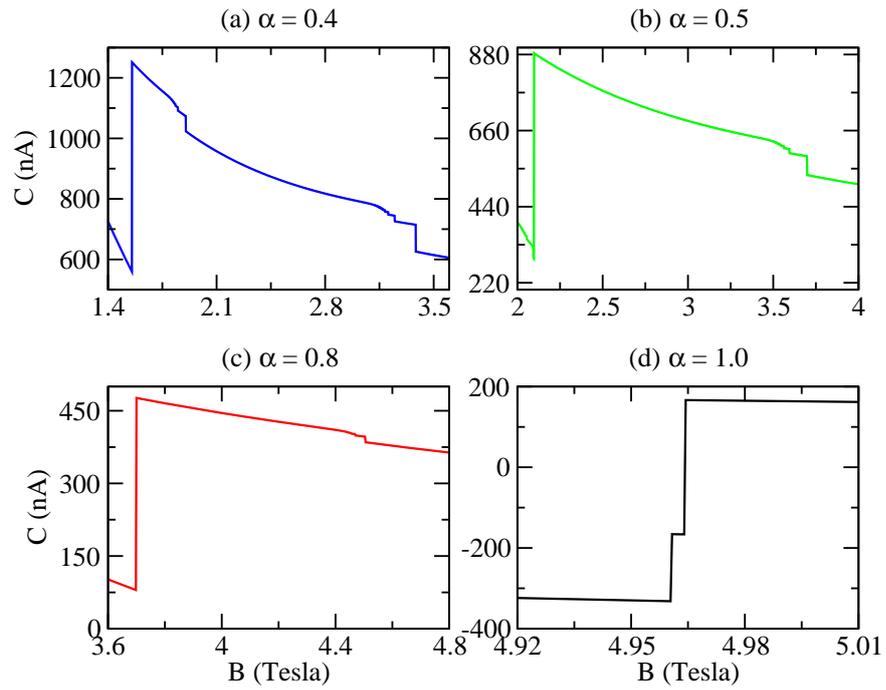


Figura 37 – Perfil da corrente persistente em um ponto quântico, dada pela Eq. (5.25), quando a sub-banda com $n = 1$ é desocupada. Para $\alpha < 1$, a desocupação não ocorre na amplitude máxima.

7 Efeitos de rotação nos estados eletrônicos de um anel quântico 1D

Nos capítulos anteriores, estudamos a influência da curvatura em sistemas mesoscópicos, especificamente no espectro de energia e outras propriedades físicas que os modelos exibem na presença de campos magnéticos externos. Nesse capítulo e no seguinte, iremos tratar de efeitos não inerciais nas energias, na magnetização e na corrente persistente em anéis quânticos. Nesse primeiro momento, vamos considerar o caso idealizado de um anel quântico 1D. Mesmo sendo idealizado, ele permite a análise de algumas propriedades físicas interessantes quando imersos em campos externos. Na prática, a largura de um anel com dimensões finitas juntamente com a intensidade do campo magnético podem ser ajustados de modo que o modelo se aproxime de um anel 1D atravessado por um fluxo de AB, ou seja, um modelo idealizado [117, 20]. A abordagem segue a receita usual. O primeiro passo consiste em obter a equação de Schrödinger em referenciais não inerciais. No passo seguinte, obtemos os autovalores de energia, a partir da qual calculamos a corrente persistente e a magnetização. É um fato conhecido na literatura que a corrente e a magnetização são quantidades proporcionais do ponto de vista de um modelo de anel 1D. De fato, vimos na Sec. 5.4 que quando $\omega_c \ll \omega_0$, a corrente é proporcional à magnetização. Também, vimos na Sec. 2 que em determinados limites, o potencial radial dado pela Eq. (2.3) descreve outros sistemas. Para o caso específico de um anel 1D, temos $r_0 = \text{constante}$ e $\omega_0 \rightarrow \infty$. Consequentemente, caímos na condição $\omega_c \ll \omega_0$. Portanto, a corrente e a magnetização apresentam comportamentos similares em um anel 1D em todo o intervalo de campo magnético. Por fim, também consideramos o efeitos de temperaturas não nulas nas propriedades físicas descritas acima. Nas análises numéricas, o intervalo de rotações é da ordem de GHz, o qual é compatível com os dados da Ref. [98]. As ideias deste Capítulo resultaram no artigo intitulado “A toy model describing noninertial effects on electronic states, persistent current and magnetization of a 1D quantum ring” [108].

7.1 Os autovalores e autofunções

Iniciamos esta seção fazendo uma comparação entre a força de Lorentz e forças inerciais. Quando um elétron se move com uma velocidade linear \mathbf{v} , na presença de campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} , ele experimenta a força de Lorentz

$$\mathbf{F}_{Lorentz} = e\mathbf{E} + e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = e[-\nabla V + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A})], \quad (7.1)$$

onde e é carga do elétron e V e \mathbf{A} são os potenciais escalar e vetorial, respectivamente. Similarmente, para uma partícula de massa m_e em um referencial não inercial, a força é

expressa como [162]

$$\mathbf{F}_{inercial} = 2m_e(\mathbf{v} \times \boldsymbol{\Omega}) - m_e\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}), \quad (7.2)$$

onde $\boldsymbol{\Omega}$ é a frequência angular e \mathbf{r} é o raio da órbita. O primeiro termo no lado direito da Eq. (7.2) refere-se à força de Coriolis, enquanto que o segundo termo corresponde à força centrífuga. Considerando $\boldsymbol{\Omega}$ constante, temos $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\Omega} = 0$. Isso significa que podemos escrever $\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{a}$, onde \mathbf{a} é um campo vetorial arbitrário. Em outras palavras, podemos escrever a rotação em termos do rotacional desse campo vetorial, similarmente ao caso em que escrevemos o campo magnético \mathbf{B} em termos do potencial vetor \mathbf{A} . Levando em conta que a força centrífuga é uma força conservativa, então é também possível pensar em um potencial escalar correspondente em analogia ao potencial escalar V . Após essa considerações, podemos escrever a relação

$$\mathbf{F}_{inercial} = m_e[-\boldsymbol{\nabla}V_{inercial} + 2\mathbf{v} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{a})]. \quad (7.3)$$

Essa expressão se parece com a expressão do lado direito da Eq. (7.1), mostrando que há uma similaridade entre os campos eletromagnéticos e o campo de rotação.

Agora vamos construir a equação de Schrödinger que descreve o movimento de uma partícula quântica de massa efetiva μ em um referencial girante na presença de um campo magnético uniforme \mathbf{B} . Nessa formulação, não vamos levar em conta os efeitos do spin do elétron. Seguindo a Ref. [163], a descrição quântica não-relativística de uma partícula em um referencial girante pode ser feita através do boost de Galileu com velocidade \mathbf{v} , dado por

$$U = e^{it\mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - im_e\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}}, \quad (7.4)$$

conectando dois referenciais inerciais F_0 e F'_0 . Mais explicitamente, temos

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{v}t, \quad t' = t. \quad (7.5)$$

Aqui, as coordenadas sem linha referem-se ao referencial F_0 , enquanto que as coordenadas com linha referem-se ao referencial F'_0 . A equação de Schrödinger no referencial F'_0 é escrita como

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{1}{2}m_e v^2\right) \psi(\mathbf{x}', t') = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p}' - m_e\mathbf{v})^2 \psi(\mathbf{x}', t'). \quad (7.6)$$

É interessante notar que essa equação pode ser obtida da equação de Schrödinger usual usando o acoplamento mínimo

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - m_e A^\mu, \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (7.7)$$

com o seguinte calibre:

$$\mathcal{A}^\mu = \left(-\frac{1}{2}v^2, \mathbf{v}\right). \quad (7.8)$$

Agora, vamos assumir que o sistema descrito pela Eq. (7.6) está em uma região onde há um campo magnético uniforme na direção z (veja a Fig. 38). A interação eletromagnética pode ser incluída na equação de Schrödinger através da substituição mínima $p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu$. Desse modo, podemos reunir as duas substituições mínimas na forma

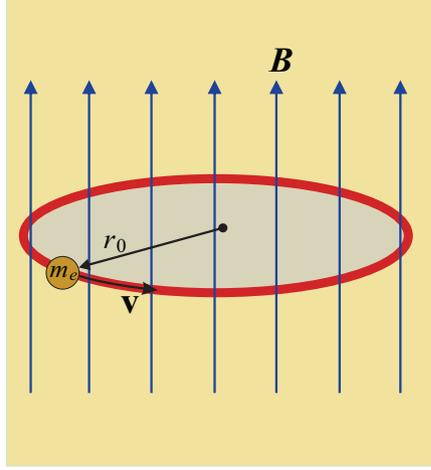


Figura 38 – Esquema de um elétron descrevendo um caminho circular de raio constante r_0 com velocidade \mathbf{v} na presença de um campo magnético uniforme \mathbf{B} . O campo magnético é aplicado perpendicular ao plano do movimento do elétron.

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu - m_e A^\mu, \quad (7.9)$$

com o campo de calibre usual dado por

$$A^\mu = (A^0, \mathbf{A}), \quad (7.10)$$

onde

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} B r \hat{\varphi} \quad (7.11)$$

é o potencial vetor que gera o campo magnético uniforme da Fig. 38. Seguindo a Ref. [163], vamos assumir que F'_0 rotaciona com uma velocidade angular constante $\boldsymbol{\Omega}$ com relação ao referencial F_0 . Com esses resultados, a equação de Schrödinger que descreve o movimento desse sistema é reescrita como

$$\frac{1}{2m_e} \left[(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - m_e\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2} m_e (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \right] \psi = E\psi. \quad (7.12)$$

Considerando que o movimento da partícula é restrito a um círculo de raio constante r_0 , a Eq. (7.12) assume a forma

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} \left(\frac{\partial}{i\partial\varphi} - l' - \frac{m_e \Omega}{\hbar} r_0^2 \right)^2 - \frac{1}{2} m_e \Omega^2 r_0^2 \right] \psi(\varphi) = E\psi(\varphi), \quad (7.13)$$

com $l' = \Phi'/\Phi_0$, onde $\Phi' = \pi r_0^2 B$ é o fluxo magnético atravessando o anel e $\Phi_0 = h/e$ corresponde ao quanta de fluxo.

As soluções da Eq. (7.13) são da forma

$$\psi(\varphi) = e^{im\varphi}. \quad (7.14)$$

A continuidade da função de onda $\psi(\varphi)$ em $\varphi = 2\pi$ exige que m deve ser um número inteiro. Podemos resolver a Eq. (7.13) usando (7.14) para encontrar os autovalores de energia em função do número quântico m e dos outros parâmetros físicos do sistema. Fazendo isso, encontramos a seguinte expressão para as energias:

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} \left(m - l' - \frac{m_e \Omega r_0^2}{\hbar} \right)^2 - \frac{1}{2} m_e \Omega^2 r_0^2, \quad (7.15)$$

com $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Assim, esse resultado generaliza o modelo da Ref. [5], incorporando os efeitos da rotação. De fato, para $\Omega = 0$, obtemos

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} (m - l')^2, \quad (7.16)$$

que é a fórmula usual para as energias de um elétron executando um caminho circular mesoscópico de raio constante r_0 .

Podemos reescrever as energias da Eq. (7.15) como

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} (m - l')^2 - \hbar \Omega (m - l'). \quad (7.17)$$

As energias escritas na forma (7.17) deixa mais explicitamente que apenas o segundo termo depende da rotação.

7.2 Propriedades eletrônicas

Nesta seção, fazemos a análise das propriedades eletrônicas do sistema. Para o caso idealizado de um anel 1D na presença de um campo magnético, a energia é modificada devido à presença do fluxo magnético passando através do centro do anel. Nesta situação, a energia E_m de um estado descreve uma parábola com energia mínima igual a zero em $l' = m$. No presente modelo, temos também contribuições na energia devido à rotação. A rotação introduz uma mudança na localização do mínimo das parábolas, correspondente a

$$l' = m - \frac{m_e \Omega r_0^2}{\hbar}. \quad (7.18)$$

Isso mostra que a relação entre a energia mínima e os estados são alterados pela presença da rotação. Neste caso, as parábolas são deslocadas para à direita (ou esquerda) dependendo se o anel está girando no sentido horário (ou anti-horário). A expressão para a energia mínima corrigida pela rotação é dada por

$$E_{min} = -\frac{1}{2} m_e \Omega^2 r_0^2 \quad (7.19)$$

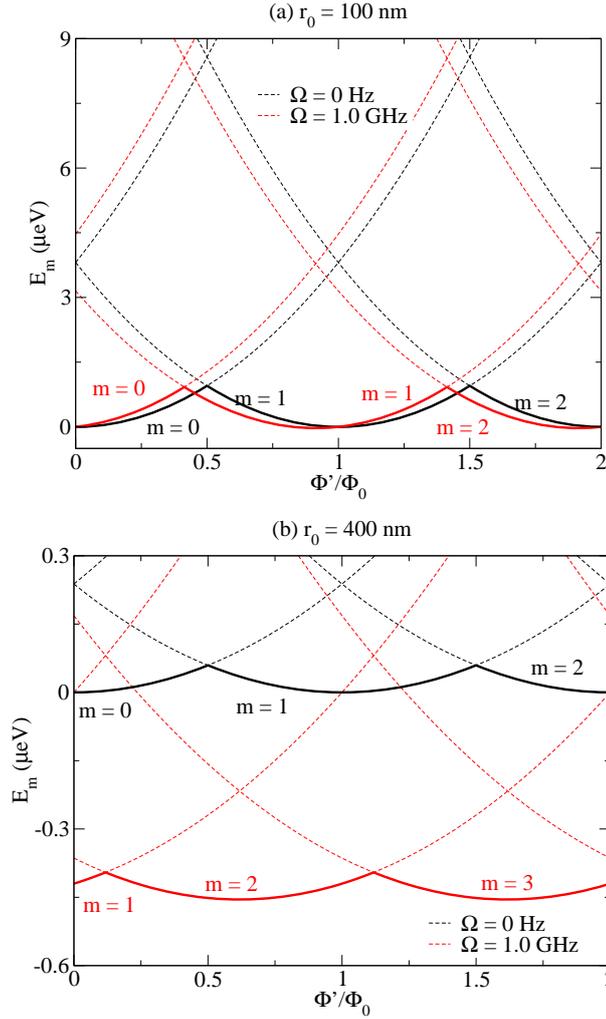


Figura 39 – Energia de um anel 1D, dada pela Eq. (7.15), como uma função de Φ'/Φ_0 para o caso sem e com rotação. Consideramos anéis com raios (a) $r_0 = 100$ nm e (b) $r_0 = 400$ nm. Note que para $\Phi'/\Phi_0 = 0$ os autovalores são duplamente degenerados, exceto para $m = 0$. As linhas contínuas descrevem o comportamento da energia de Fermi quando há um único elétron no anel 1D.

e é, portanto independente do sentido da rotação. Os resultados expressos pelas Eqs. (7.18) e (7.19) descrevem a analogia entre o calibre eletromagnético e a rotação (Eqs. (7.1) e (7.2), resultando nos autovalores de energia dado pela Eq. (7.15)). É um fato bem conhecido que o espectro de um anel 1D é uma função periódica do fluxo magnético, oscilando com um período $\Phi_0 = h/e$ [32]. A rotação não altera o período das oscilações. Para ilustrar o comportamento do sistema com relação ao campo magnético e a rotação em mais detalhes, mostramos na Fig. 39 os esboços das energias como uma função de Φ'/Φ_0 para anéis com raios de 100 nm (Fig. 39(a)) e de 400 nm (Fig. 39(b)), considerando $\Omega = 0$ Hz e $\Omega = 1.0$ GHz. Como estamos considerando uma rotação em sentido anti-horário, as parábolas são deslocadas para à esquerda. Podemos ver claramente que os efeitos de rotação são mais evidentes para o anel de raio $r_0 = 400$ nm. Essa característica é uma manifestação devido ao fato de que a influência da rotação nas energias depende do tamanho do sistema. Outro

aspecto relevante manifestado nos estados de energia está relacionado à degenerescência. Sabemos que a energia de um elétron confinado em um anel 1D é $\hbar^2 m^2 / (2m_e r_0^2)$, e assim, o sistema é duplamente degenerado, exceto o estado com $m = 0$. A introdução de um campo magnético quebra a degenerescência em m , isto é, para um dado l' , os diferentes estados com um dado m não têm a mesma energia. Isso pode ser checado analisando as Eqs. (7.15) e (7.17). Vale a pena notar, contudo, que para diferentes combinações de $(m - l')$ podemos encontrar a mesma energia, já que o fluxo é quantizado. O fluxo magnético controla o perfil da energia e a partícula sempre tem uma tendência em ocupar o estado de menor energia, como mostra a Fig. 39. Um caso particularmente interessante acontece quando $l' = -m_e \Omega r_0^2 / \hbar$, o qual corresponde à uma frequência $\Omega = -\omega_c / 2$, sendo $\omega_c = eB / m_e$ a frequência ciclotrônica. Para este valor particular, a rotação cancela o efeito do campo magnético no termo cinético da energia e a energia assume a forma

$$E_m(\Omega = -\omega_c/2) = \frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} m^2 - \frac{1}{2} m_e r_0^2 \Omega^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} (m^2 - l'^2). \quad (7.20)$$

Assim, para $\Omega = -\omega_c/2$, diferentes de outros casos, a influência da rotação nos níveis de energia corresponde apenas a um deslocamento nos níveis. Isso pode ser justificado verificando que a rotação e o fluxo magnético contribuem para o momento angular total da partícula. Dessa forma, é possível ajustar o campo magnético e a rotação para modificar (ou não) os estados. Em particular, podemos definir um momento angular efetivo dado por $j_m = \pm m - (l' + \lambda\Omega)$, onde $\lambda = m_e r_0^2 / \hbar$.

Outro ponto relevante consiste em estudar unicamente o efeito da rotação fazendo $l' = 0$ nas expressões para as energias. Podemos interpretar a quantidade $\hbar\Omega m$ na Eq. (7.17) como um acoplamento entre a rotação e o momento angular do elétron. Esse acoplamento rotação-momento angular pode aumentar ou diminuir a energia dos estados. Por exemplo, se o anel for colocado para girar no sentido anti-horário, então as energias dos estados com $-m$ são afetadas de uma forma diferente dos estados com $m > 0$. Na Fig. 40(a), esboçamos as energias em função de m e Ω , considerando um anel de raio $r_0 = 400$ nm. Como podemos observar, os autovalores de energia têm uma dependência linear com relação a rotação. A inclinação depende do valor do número quântico m . Se $m > 0$ ($m < 0$) a inclinação é positiva (negativa) como podemos ver na Fig. 40(b) um exemplo considerando os estados com $m = \pm 1$.

Para finalizar esta seção, podemos comparar a ordem de magnitude entre o primeiro e o segundo termos na Eq. 7.17. O primeiro termo corresponde aos níveis de energia de uma partícula confinada em um anel quântico e inclui o fluxo magnético enquanto o segundo se refere à contribuição devido à rotação. Vamos considerar um anel de raio $r_0 = 200$ nm, com $\Omega = 10^9$ Hz, $B = 0.012$ T and $m = 1$. Nesse caso, o primeiro termo contribui com $0.82 \mu\text{eV}$, enquanto o segundo contribui com $0.61 \mu\text{eV}$ mostrando que a contribuição inercial pode ter a mesma ordem de magnitude do primeiro termo, dependendo dos parâmetros do sistema. A Fig. 41 mostra o perfil completo da energia de um único elétron em função do

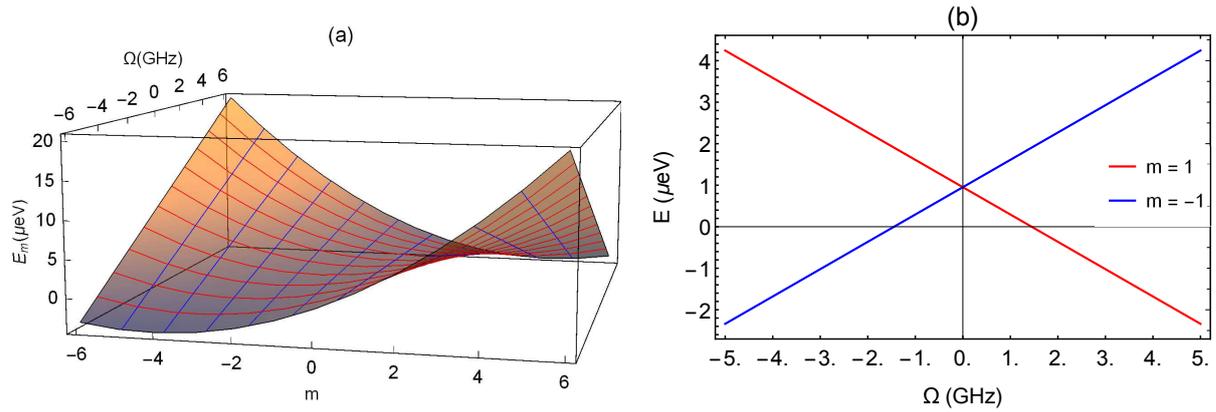


Figura 40 – Na Fig. (a), mostramos a energia de um anel 1D, dada pela Eq. (7.15), em função de Ω and m . Na Fig. (b), ilustramos a energia em função de Ω , enfatizando apenas os estados com $m = \pm 1$. Nas duas figuras consideramos um anel de raio $r_0 = 400$ nm.

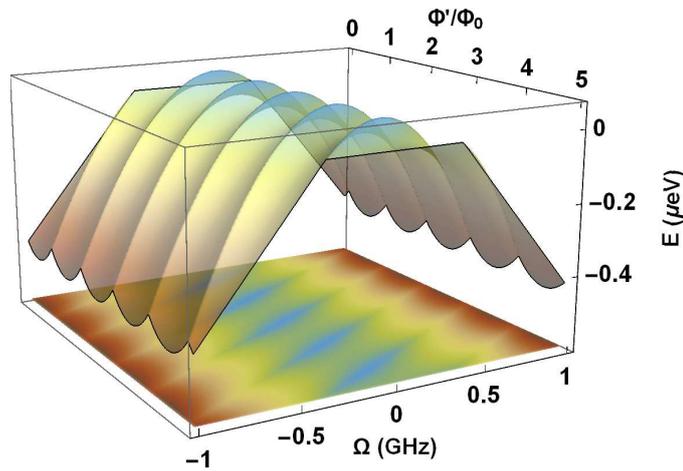


Figura 41 – Energia de um Fermi (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) de um único elétron em função de Φ'/Φ_0 e Ω .

fluxo magnético e da rotação simultaneamente. Podemos ver que estados são deslocados para à direita ou para à esquerda dependendo do sentido da rotação, enquanto que as oscilações são mantidas.

7.3 Corrente persistente

Nesta seção, estudamos a corrente persistente e sua dependência com a temperatura em um anel 1D rotacionando. Para calcular a corrente persistente, novamente usamos a relação de Byers-Yang [28]. Usando a energia E_m dada pela Eq. (7.15), obtemos

$$I_m = \frac{e\hbar}{2\pi m_e r_0^2} \left(m - l' - \frac{m_e \Omega r_0^2}{\hbar} \right). \quad (7.21)$$

A corrente total é a contribuição de todos os estados abaixo da energia de Fermi.

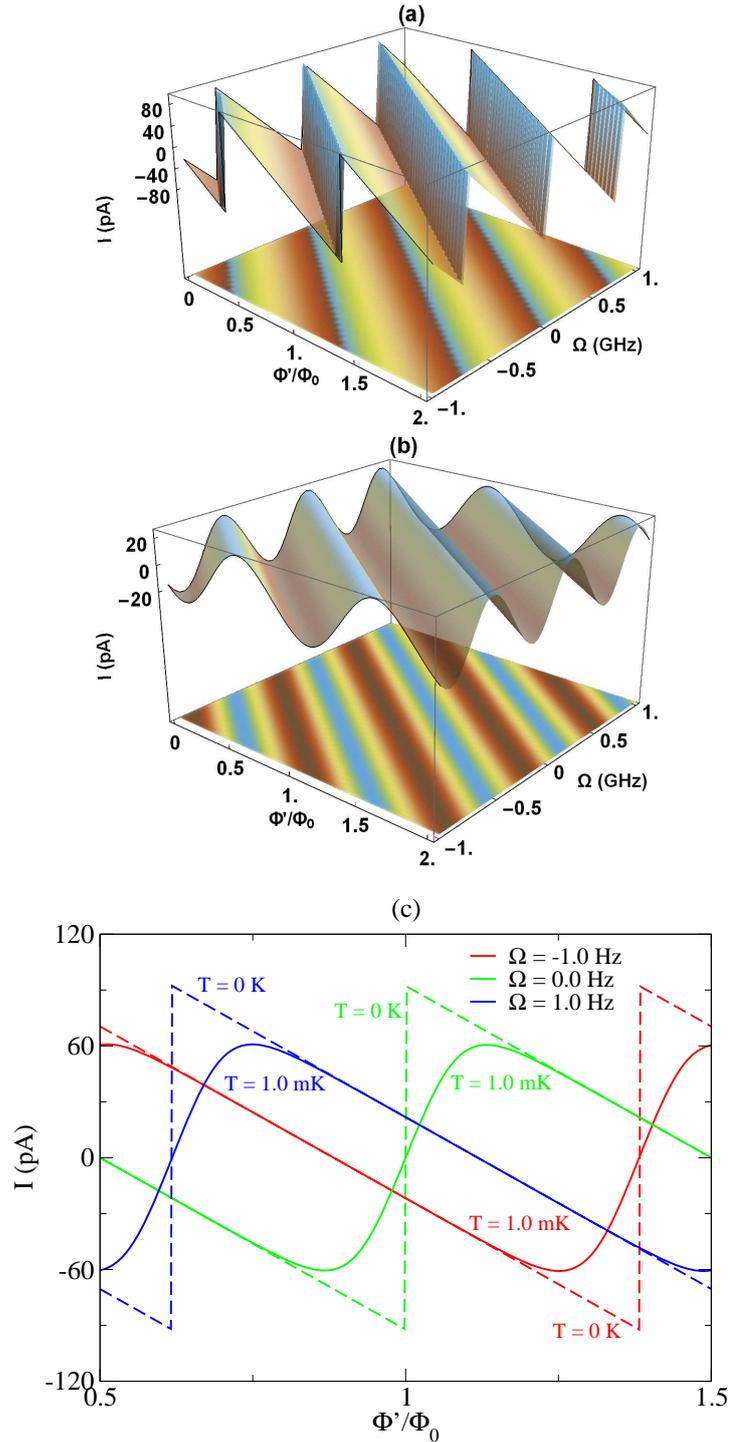


Figura 42 – Corrente persistente em um anel 1D, dada pela Eq. (7.22), em função de Ω , (a) $T = 0$, (b) $T = 3$ mK. Em (c), a corrente persistente em função de Φ' para $\Omega = -1.0$ GHz (linhas vermelhas contínua e tracejada), $\Omega = 0$ Hz (linhas verdes contínua e tracejada) e $\Omega = 1.0$ GHz (linhas azuis contínua e tracejada). As linhas contínua e tracejadas correspondem à $T = 0$ K e $T = 1.0$ mK, respectivamente.

Como queremos estudar a dependência da corrente persistente com a temperatura, usamos

$$I = \sum_m I_m f(E_m), \quad (7.22)$$

onde $f(E_m)$ é a função distribuição de Fermi [31, 51]. Quando $\Omega = 0$, sabemos que a corrente apresenta um comportamento periódico com respeito ao fluxo magnético. Se o sistema é uma amostra rotacionando, então aparece um termo na corrente, o qual tende a transladar as oscilações. Este efeito está intimamente relacionado com o deslocamento das parábolas que descreve os estados de energia discutidos na Seção anterior.

Na Fig. 42, mostramos o esboço da corrente persistente em função do parâmetro de fluxo e da rotação. Na Fig. 42(a), plotamos o perfil e a correspondente densidade da corrente em função do fluxo magnético l' e da rotação Ω na temperatura zero. Podemos ver que a rotação mantém as oscilações, mas introduz uma contribuição linear na corrente, como mostra a Eq. (7.21). Na Fig. 42(b), fazemos um plote similar, mas a amostra é mantida a uma temperatura $T = 3.0$ mK. Na Fig. 42(c), plotamos a corrente em função do fluxo magnético considerando temperaturas de $T = 0$ K e $T = 1.0$ mK, e assumindo $\Omega = 0$ Hz, $\Omega = 1.0$ GHz e $\Omega = -1.0$ GHz, respectivamente. Como podemos ver, a temperatura tende a suavizar as oscilações bem como reduzir a amplitude da oscilação na corrente persistente.

7.4 Magnetização

Nesta seção, estudamos a magnetização em um anel 1D e também sua dependência com a temperatura. Novamente, a magnetização é calculada usando a relação

$$M = -\frac{\partial U}{\partial B} = -\sum_m M_m f(E_m), \quad (7.23)$$

onde $M_m \equiv -\partial E_m / \partial B$ define o momento magnético. No presente caso, M_m é dado explicitamente por

$$M_m = \frac{e\hbar}{2m_e} \left(m - l' - \frac{m_e \Omega r_0^2}{\hbar} \right). \quad (7.24)$$

Se a amostra não está girando, sabemos que a corrente persistente e a magnetização são relacionados por

$$M_m = \pi r_0^2 I_m. \quad (7.25)$$

Esse resultado permanece válido quando incluímos efeito de uma força inercial, no caso a rotação. Na Fig. 43(a), mostramos um plote 3D da magnetização como uma função de l' e Ω à temperatura zero. Esse mesmo perfil a uma temperatura $T = 3.0$ mK é esboçado na Fig. 43(b). A magnetização em função de l' para alguns valores de Ω é mostrado na Fig. 43(c). Podemos observar claramente uma similaridade entre os perfis da magnetização e da corrente persistente (veja a Fig. 42), mostrando também que a rotação não muda a relação entre corrente e magnetização, como foi observado na Eq. 7.25.

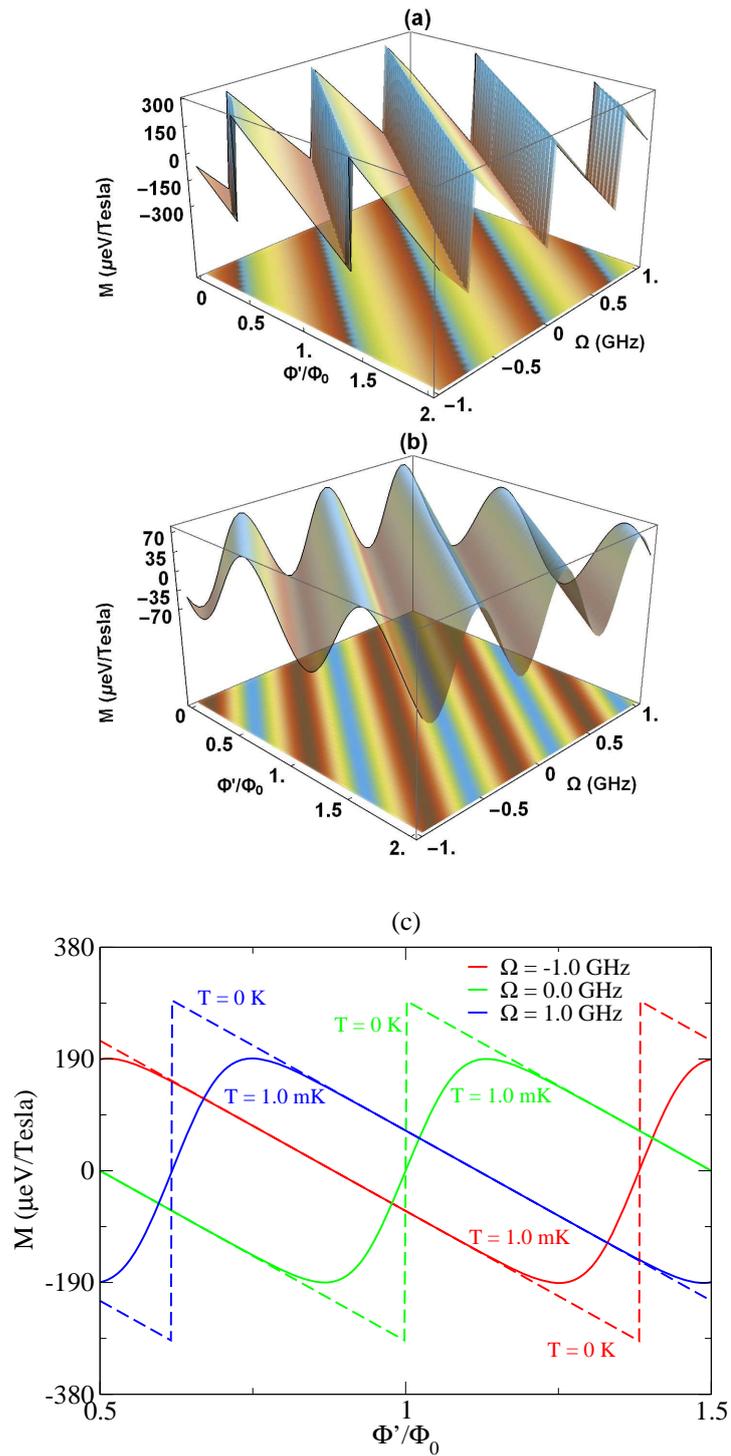


Figura 43 – (a) Magnetização em um anel 1D, dada pela Eq. (7.23), em função de Φ' e Ω a temperatura zero. (b) A amostra está mantida a uma temperatura de $T = 3$ mK. (c) Esboços da magnetização para $\Omega = -1.0$ GHz, $\Omega = 0$ Hz e $\Omega = 1.0$ GHz. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às temperaturas de $T = 0$ K e $T = 1.0$ mK, respectivamente.

8 Efeitos de rotação nos estados eletrônicos de um anel quântico 2D

A equação de Schrödinger que descreve o movimento dos elétrons em repouso em um referencial em rotação com relação a um referencial inercial foi apresentada no Capítulo anterior. Lá, nos limitamos a analisar o movimento em um anel 1D. O modelo 1D, embora seja um modelo simplificado, permitiu o desenvolvimento da física de sistemas anelares mesoscópicos. Contudo, para um melhor entendimento teórico das propriedades físicas de elétrons em anéis exige-se uma ampliação da complexidade do modelo, ou seja, devemos levar em conta a largura finita dos anéis. Portanto, neste capítulo, vamos tratar do estudo de elétrons em um anel 2D. Não usaremos o potencial radial (veja a Eq. (2.3)) para descrever matematicamente o anel bidimensional. Ao invés disso, vamos considerar o potencial de confinamento forte dado pela Eq. (2.1). A primeira parte do estudo consiste em determinar e analisar os níveis de Landau quando efeitos não inerciais são levados em conta. Já estudamos na Sec. 3.3 os níveis de Landau usuais. Na segunda parte, tratamos o caso dos estados eletrônicos em um anel 2D. Para isso, fazemos algumas aproximações na equação de movimento. A equação resultante é uma equação bastante conhecida na literatura (veja por exemplo a Ref. [164]) e sua solução leva às funções cilíndricas parabólicas. O modelo permite encontrar uma equação transcendental, da qual podemos obter as energias do anel. No estudo da corrente persistente, limitamos-nos a fazer simplesmente uma análise conceitual desse fenômeno quântico. Essa restrição resulta da forma como as energias são obtida. Os resultados deste Capítulo ainda estão em análise para futuras publicações.

8.1 Níveis de Landau

A equação de Schrödinger que descreve o movimento do sistema é dada pela Eq. (7.12), a saber

$$\frac{1}{2m_e} \left[(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - m_e\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2}m_e(\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \right] \psi = E\psi. \quad (8.1)$$

Assim, semelhante ao capítulo anterior, vamos assumir que o movimento é planar, fazendo $\mathbf{p}_z = \mathbf{A}_z = 0$ e também assumimos que o sistema rotaciona com velocidade angular $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \hat{z}$. Nesse caso, a equação de Schrödinger (8.1) assume a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{r^2}{4\lambda_1^4} - \frac{i}{\lambda_2^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \psi = E\psi, \quad (8.2)$$

onde

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_1}}, \quad (8.3a)$$

$$\lambda_2 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_2}}, \quad (8.3b)$$

definem os comprimentos magnéticos efetivos, e

$$\omega_1 = \sqrt{\omega_c^2 + 4\Omega\omega_c}, \quad (8.4a)$$

$$\omega_2 = \omega_c + 2\Omega, \quad (8.4b)$$

são as frequências efetivas, onde $\omega_c = eB/\mu$ é a frequência ciclotrônica. Para $\Omega > 0$, o sistema gira no sentido anti-horário, enquanto que $\Omega < 0$, o sistema gira no sentido horário. Da Eq. (8.4a), podemos imediatamente verificar que a frequência ω_1 é real somente para $\Omega \geq -0.25\omega_c$. Contudo, se $\Omega = -0.25\omega_c$, a frequência ω_1 é igual a zero, enquanto que a frequência ω_2 assume o valor $\omega_c/2$.

Usando o ansatz

$$\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} f(r), \quad (8.5)$$

com $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, e substituindo na Eq. (8.2), obtemos a equação radial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + V_{eff}(r) \right] f(r) = Ef(r), \quad (8.6)$$

onde

$$V_{efe}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{r^2} + \frac{r^2}{4\lambda_1^4} - \frac{m}{\lambda_2^2} \right) \quad (8.7)$$

é o potencial efetivo. Observe que se $\Omega = -0.25\omega_c$ (veja discussão no parágrafo anterior), o termo proporcional à r^2 na Eq. (8.7) é eliminado e o sistema resultante não implicará na quantização de Landau. Assim, para evitarmos essa situação, não usaremos esse valor para Ω nas considerações abaixo.

Para o modelo de anel em questão, o raio de um estado com um dado m é expresso como

$$r_m = \lambda_1 \sqrt{2|m|}, \quad (8.8)$$

o qual determina a posição radial dos estados. Esse resultado também afirma que quanto maior for o valor absoluto de m , mais distante da origem está posicionado o estado. Por outro lado, aumentando a intensidade do campo magnético, os estados tendem a ocupar posições radiais menores. Mantendo o estado e o campo magnético fixos, observamos que se $\Omega > 0$ o estado ocupa uma menor posição radial, enquanto que para $\Omega < 0$ o estado ocupa uma maior posição radial. Em outras palavras, podemos argumentar que dependendo do sinal de Ω , o efeito da rotação é transladar a posição dos estados para a esquerda ou para a direita do caso em que a rotação é nula. Além disso, também notamos que os estados

com m e $-m$ ocupam a mesma posição radial. Estudando a Eq. (8.7), podemos mostrar que o potencial mínimo de um estado com um dado m é escrito como

$$V_m = \frac{1}{2} |m| \hbar (\omega_1 \mp \omega_2), \quad (8.9)$$

onde o sinal $-$ ($+$) refere-se aos estados com $m > 0$ ($m < 0$). O estado com $m = 0$ tem o potencial mínimo igual a zero. Portanto, embora os estados com m e $-m$ ocupem a mesma posição radial, o potencial mínimo desses estados é diferente. De fato, se $\Omega = 0$ na Eq. (8.9), temos $\omega_1 = \omega_2 = \omega_c$, e assim, os estados com $m \geq 0$ têm o potencial mínimo nulo, enquanto que os estados com $m < 0$ têm potencial mínimo não nulo e positivo. Se $\Omega \neq 0$, podemos verificar a partir das Eqs. (8.4a) e (8.4b) que $\omega_1 < \omega_2$ para todo $\Omega > -0.25\omega_c$. Assim, os estados com $m > 0$ adquirem um potencial mínimo não-nulo e negativo. Os estados com $m < 0$ mantêm um potencial mínimo positivo. Para deixar mais clara essas características extraídas do potencial efetivo (8.7), fazemos alguns esboços na Fig. 44 para diferentes valores de Ω e $B = 0.1$ Tesla. Podemos ver claramente que os

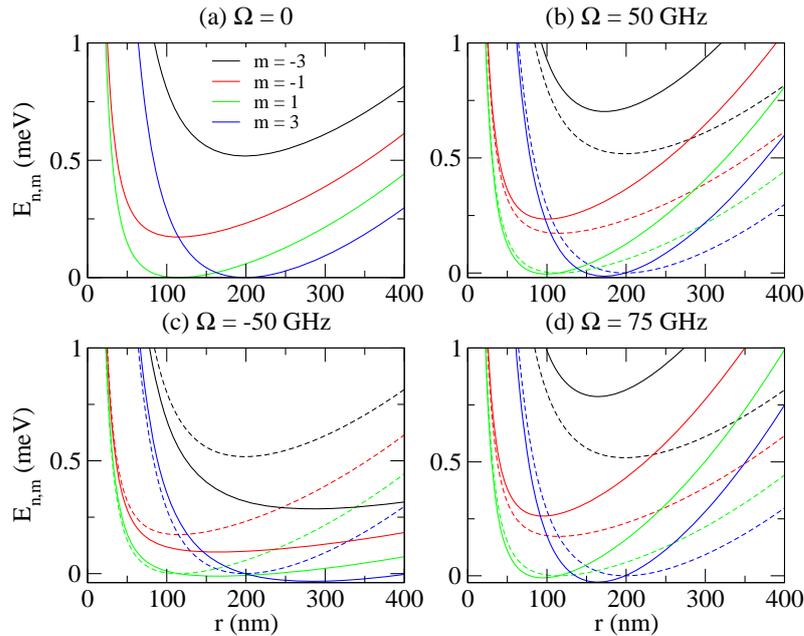


Figura 44 – Potencial efetivo, dado pela Eq. (8.7), em função da distância radial r . Em (b), (c) e (d), as linhas tracejadas correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. Em (a), vemos que os estados simétricos têm a mesma posição radial, enquanto que em (b), e (d), os pontos de mínimo são deslocados para menores valores de r quando $\Omega > 0$. Por outro lado, para $\Omega < 0$, os estados tendem a ocupar posições radiais maiores. Além disso, em (b), (c) e (d) também observamos que os efeitos sobre o potencial mínimo do estados mais baixos são mais evidentes para os estados com $m < 0$.

efeitos da rotação no potencial mínimo dos primeiros estados com $m > 0$, implicam em uma pequena correção no perfil do potencial, enquanto que nos primeiros estados com $m < 0$ os efeitos são maiores (veja a Fig. 44). Para estados com $m > 0$ mais altos, os efeitos da rotação são observados, como mostra a Fig. 45 para $m = 10$, $m = 30$ e $m = 50$.

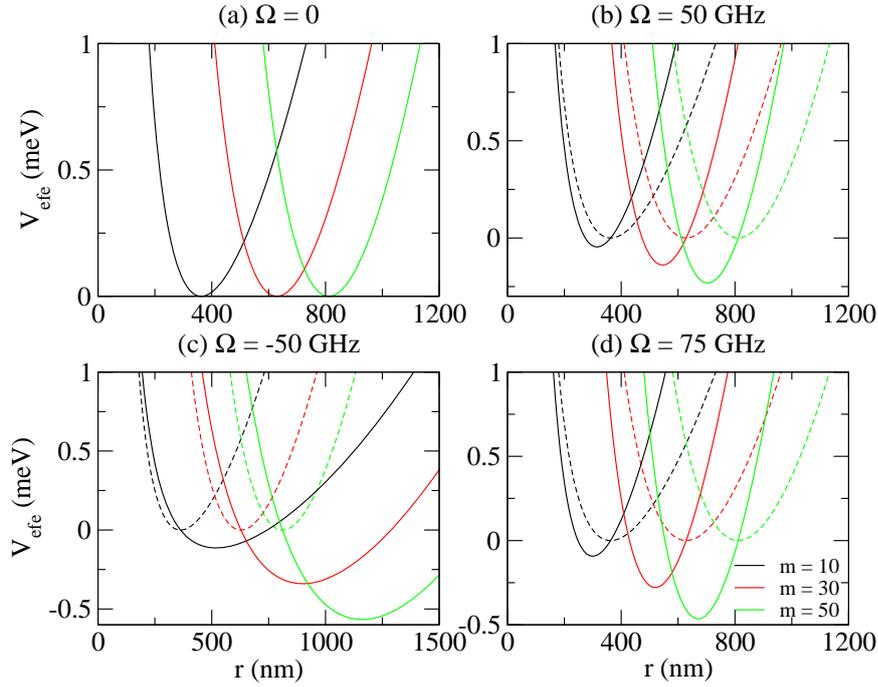


Figura 45 – Potencial efetivo, dado pela Eq. (8.7), em função da distância radial r . Mostramos o potencial efetivo dos estados positivos $m = 10$ (linha contínua preta), $m = 30$ (linha contínua vermelha) e $m = 50$ (linha contínua verde). Em (b), (c) e (d), as linhas tracejadas correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. Podemos observar um maior efeito da rotação nos estados com $m > 0$.

Agora, vamos retornar à Eq (8.6). A solução dessa equação é bem conhecida e é dada em termos da função hipergeométrica confluyente do primeiro tipo. Dessa maneira, as funções (8.5) normalizadas são dadas por

$$\psi(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda_1} \sqrt{\frac{\Gamma(|m| + n + 1)}{2^{|m|} n! \Gamma(|m| + 1)^2}} e^{-\frac{r^2}{4\lambda_1^2}} e^{im\varphi} \left(\frac{r}{\lambda_1}\right)^{|m|} {}_1F_1\left(-n, |m| + 1, \frac{r^2}{2\lambda_1^2}\right), \quad (8.10)$$

e os correspondentes autovalores de energias são

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_1 + V_m, \quad (8.11)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, onde $\Gamma(x)$ é a função gama, and ${}_1F_1(a, b; z)$ é a função hipergeométrica confluyente de primeiro tipo [160]. Identificamos acima que quando $\Omega = 0$ na Eq. (8.9), a energia potencial mínima dos estados com $m \geq 0$ é zero. Assim, para cada nível n , temos a formação de níveis de energia infinitamente degenerados, os quais são comumente conhecidos como os níveis de Landau. O gap de energia entre níveis de Landau consecutivos corresponde a $\hbar\omega_c$. Em contraste a este resultado, os estados com $m < 0$ têm potencial mínimo dado por $V_m = |m|\hbar\omega_c$. Isso não implica que os estados com $m < 0$ não são degenerados. De fato, uma vez que o potencial mínimo é proporcional à $\hbar\omega_c$, esses estados pertencem aos níveis de Landau com $(n + |m|)$. Quando $\Omega \neq 0$, todos os estados com $m \neq 0$ têm potencial mínimo não-nulo (Eq. 8.9), o qual é proporcional à diferença (soma)

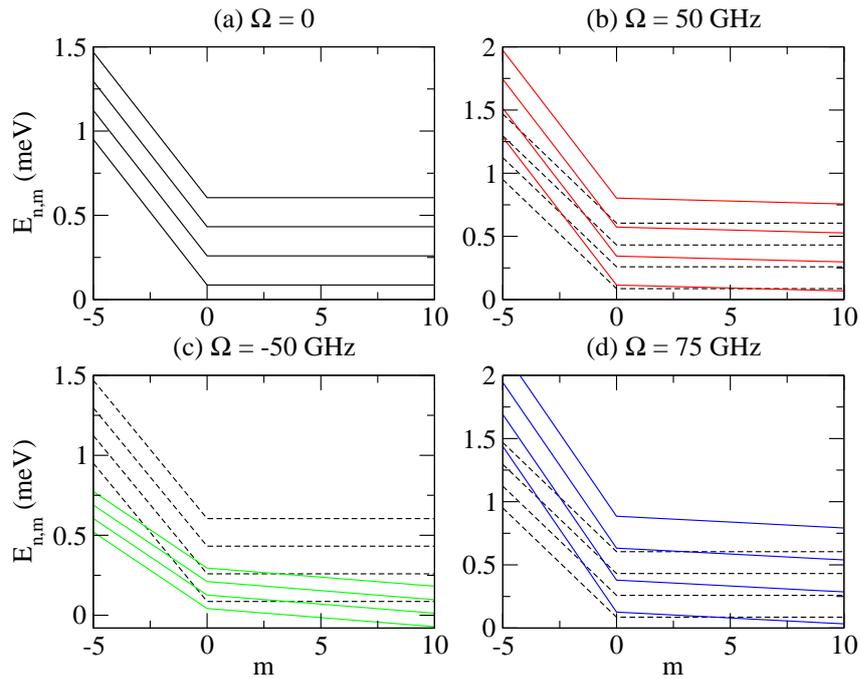


Figura 46 – Energias, dadas pela Eq. (8.11), em função do número quântico m para $B = 0.1$ Tesla. Podemos observar a formação dos primeiros quatro níveis de Landau. Além disso, é possível ver os efeitos da energia potencial V_m , dada pela Eq. (8.9), nos estados com $m > 0$ e $m < 0$ para diferentes valores de Ω .

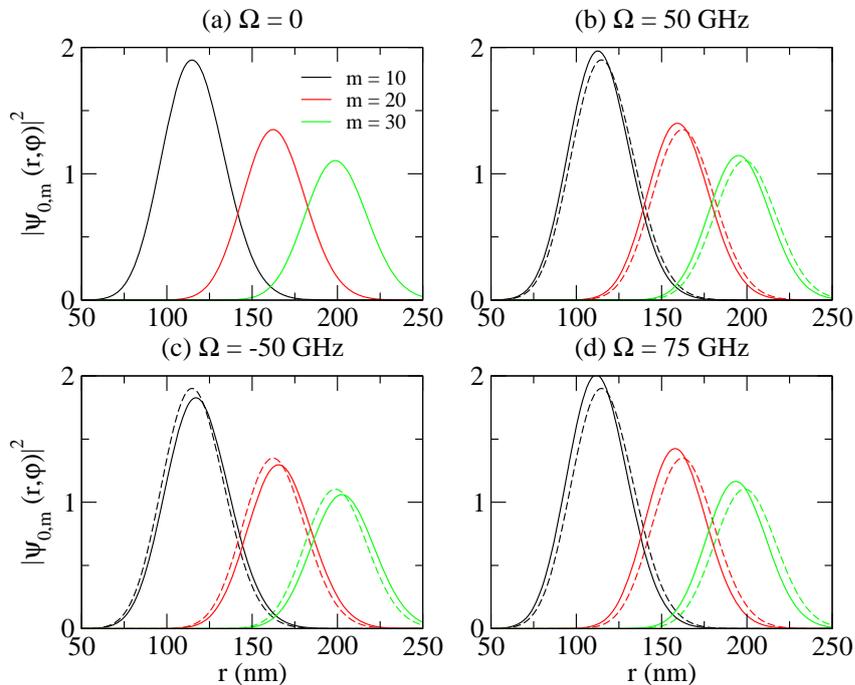


Figura 47 – Densidade de probabilidade de alguns estados (Eq. (8.10)) em função de r para $B = 1.0$ Tesla. As linhas tracejadas em (b), (c) e (d) correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. A amplitude máxima da densidade de probabilidade se desloca para menores valores de r à medida que Ω aumenta.

entre as frequências ω_1 e ω_2 . Como o primeiro termo na energia é proporcional à ω_1 , então a degenerescência dos níveis de Landau é eliminada. Além disso, o espaçamento entre níveis de Landau consecutivos é dado por $\hbar\omega_1$, de modo que para valores de Ω no intervalo $] -0.25, 0[$ o espaçamento diminui, enquanto para $\Omega > 0$ ele aumenta. Na Fig. 46, mostramos os primeiros quatro níveis de Landau para o caso quando $B = 0.1$ Tesla e alguns valores de Ω . Na ausência de rotação ($\Omega = 0$), temos os níveis de Landau usuais, os quais são representados pelas linhas pretas. Para $\Omega > 0$, verificamos que as frequências ω_1 e ω_2 aumentam, enquanto que para $\Omega < 0$ ocorre uma diminuição dessas frequências. Essas variações em ω_1 e ω_2 revelam mudanças significantes no espaçamento entre os níveis consecutivos e também no valor do potencial mínimo. De fato, as Figs. 46(b) e 46(d) (Fig. 46(c)) revelam um aumento (redução) do espaçamento entre os níveis de Landau consecutivos se $\Omega > 0$ ($\Omega < 0$). Portanto, os níveis de Landau são modificados pela rotação. Na Fig. 47, exibimos a densidade de probabilidade para alguns estados no nível $n = 0$, para diferentes valores Ω e campo magnético fixado em $B = 1.0$ Tesla. As linhas tracejadas em 47(b)-(d) correspondem ao caso em que $\Omega = 0$. Vemos que a amplitude máxima dos estados é deslocada para valores menores de r à medida que Ω aumenta (veja as Figs. 47(b) e (d)). Se $\Omega < 0$, a amplitude máxima se desloca para valores maiores de r , como mostra a Fig. 47(c).

8.2 Estados eletrônicos de um anel quântico bidimensional

Nesta seção, estudamos o modelo de um 2DEG confinado em um anel mesoscópico de raios interno e externo r_- and r_+ , respectivamente. O anel está em um referencial girante e na presença de um campo magnético B perpendicular à amostra (veja a Fig. 48). O potencial de confinamento que modela o anel é definido por

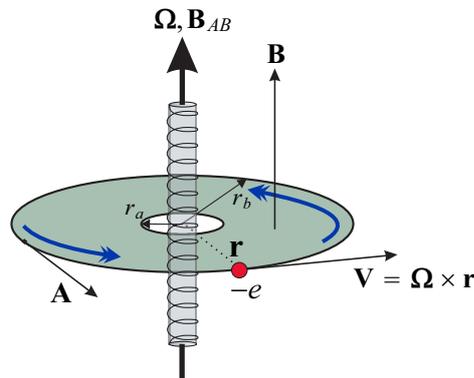


Figura 48 – Idealização de um gás de elétrons bidimensional confinado em um anel girando e sujeito a um campo magnético uniforme perpendicular à amostra. Além disso, há um fluxo de AB atravessando a amostra ao centro (solenoide localizado).

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{se } r_- \leq r \leq r_+ \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (8.12)$$

Para números quânticos m grandes, a equação diferencial radial (8.6) pode ser aproximada para

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\mu\omega_1^2}{2} (r - r_m)^2 \right] f(r) = (E_{\nu,m} - V_m) f(r). \quad (8.13)$$

A equação diferencial acima tem exatamente a forma da equação diferencial de um oscilador quântico unidimensional com frequência ω_1 . Os autovalores dessa equação diferencial são dados por

$$E_{\nu,m} = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_1 + V_m, \quad (8.14)$$

onde ν é um número não necessariamente inteiro. Próximo à borda interna, devemos procurar por soluções que se anulam a medida que $r - r_m \rightarrow \infty$. A solução da Eq. (8.13) que satisfaz a essa condição é dada pela função cilíndrica parabólica [164]:

$$f_\nu(r - r_m) = 2^{\frac{\nu}{2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r - r_m}{\lambda_1} \right)^2} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{2}\right)} {}_1F_1\left(-\frac{\nu}{2}, \frac{1}{2}; \left(\frac{r - r_m}{\lambda_1}\right)^2\right) + \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} \left(\frac{r - r_m}{\lambda_1}\right) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{2}, \frac{3}{2}; \left(\frac{r - r_m}{\lambda_1}\right)^2\right) \right]. \quad (8.15)$$

As autofunções referentes à borda externa são derivadas dessa solução implementando a mudança $r - r_m \rightarrow r_m - r$ com a exigência de que $f_\nu(r_m - r) \rightarrow 0$ quando $r_m - r \rightarrow \infty$.

Os zeros da função cilíndrica parabólica são encontrados impondo que $f_\nu(r_- - r_m)$ se anule em $r = r_-$ e $r = r_+$. O argumento $r_- - r_m$ ($r_+ - r_m$) se refere à distância que um estado m se encontra da borda interna (externa). Se essa distância for grande, a função de onda $f_\nu(r_- - r_m)$ pode ser aproximada para [165]

$$f_\nu(r_- - r_m) = \frac{e^{\left(\frac{r_- - r_m}{\lambda_1}\right)^2}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} \left(\frac{r_- - r_m}{\lambda_1}\right)^{-(\nu+1)}. \quad (8.16)$$

Para que a condição $f_\nu(r_- - r) = 0$ permaneça válida, devemos garantir que $\nu = n = 0, 1, 2, \dots$. Usando a função de onda referente aos estados da borda externa, $f_\nu(r_m - r_+)$, encontramos esse mesmo resultado. Dessa forma, podemos concluir que, para os estados pertencentes ao intervalo $r_- < r_m < r_+$ com $|r_- - r_m|$ muito maior do que o raio ciclôtrônico, os autovalores de energia são dados por $E_{\nu,m} = E_{n,m}$, onde $E_{n,m}$ é dado pela Eq. (8.11). Se $\Omega = 0$, recuperamos os níveis de Landau usuais. Além disso, para $\nu = n = 0, 1, 2, 3, \dots$, a função cilíndrica parabólica é proporcional à função de Hermite [165, 166]. Esses estados estão todos localizados no interior do anel. Esse mesmo resultado foi obtido por Halperin [109] e MacDonald [110].

Para estudar o espectro de um anel 2D em rotação dado pela Eq. (8.14), fazemos uma análise numérica. Para isso, consideramos um anel 2D de raios interno e externo dados por $r_- = 540$ nm e $r_+ = 810$ nm, respectivamente. Para o campo magnético uniforme

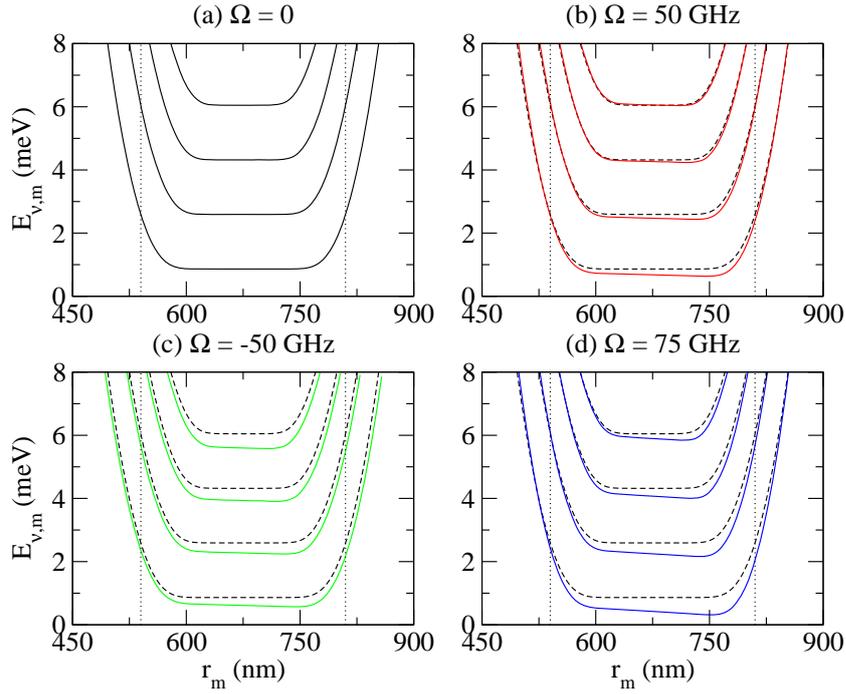


Figura 49 – Níveis de energia de um anel 2D, dados pela Eq. (8.8), em função da posição radial r_m , dada pela Eq. (8.8). Consideramos o campo magnético $B = 1.0$ Tesla. As linhas pretas pontilhadas (verticais) correspondem aos raios do anel, dados por $r_- = 540$ nm e $r_+ = 810$ nm. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d), correspondem ao caso em que $\Omega = 0$.

perpendicular à amostra, usamos a intensidade de $B = 1.0$ Tesla. Na Fig. 49, exibimos o comportamento de $E_{\nu,m}$ em função de r_m . No interior da amostra anelar, vemos os níveis de Landau, os quais são degenerados se $\Omega = 0$, e não degenerados se $\Omega \neq 0$. Na bordas, contudo, as energias aumentam monotonicamente; os níveis de energia passam a ser uma função crescente de r_m . Os estados próximos às bordas são comumente referidos na literatura como estados de borda.

Os resultados descritos acima têm implicações diretas no comportamento da energia de Fermi. Na Fig. 50, observamos uma formação de platôs, quando o sistema não está girando ($\Omega = 0$). De fato, nesse caso, temos a formação dos níveis de Landau para os estados localizados no interior do anel, os quais são degenerados. Entre os platôs, a energia de Fermi cresce. O comportamento da energia de Fermi de um anel 2D é facilmente entendido. Adicionando elétrons um a um no sistema, obviamente que eles tendem a ocupar os níveis menores de energia (veja a Fig. 49), as partículas acessam o primeiro nível de Landau. Então, a ocupação eletrônica ocorre inicialmente nos estados localizados no interior do anel. Contudo, à medida que os elétrons são introduzidos no anel, os estados da borda também passam a ser ocupados. Nesse momento, a energia de Fermi cresce monotonicamente, até atingir o segundo nível de Landau. O processo de ocupação eletrônica se repete enquanto mais elétrons estiverem sendo adicionados ao sistema. Esse resultado é válido quer $\Omega = 0$

ou $\Omega \neq 0$. A diferença é que para $\Omega \neq 0$ não temos mais degenerescência nos estados localizados no interior da amostra. Como é observado na Fig. 50, a energia de Fermi cresce linearmente entre os platôs, para $\Omega \neq 0$.

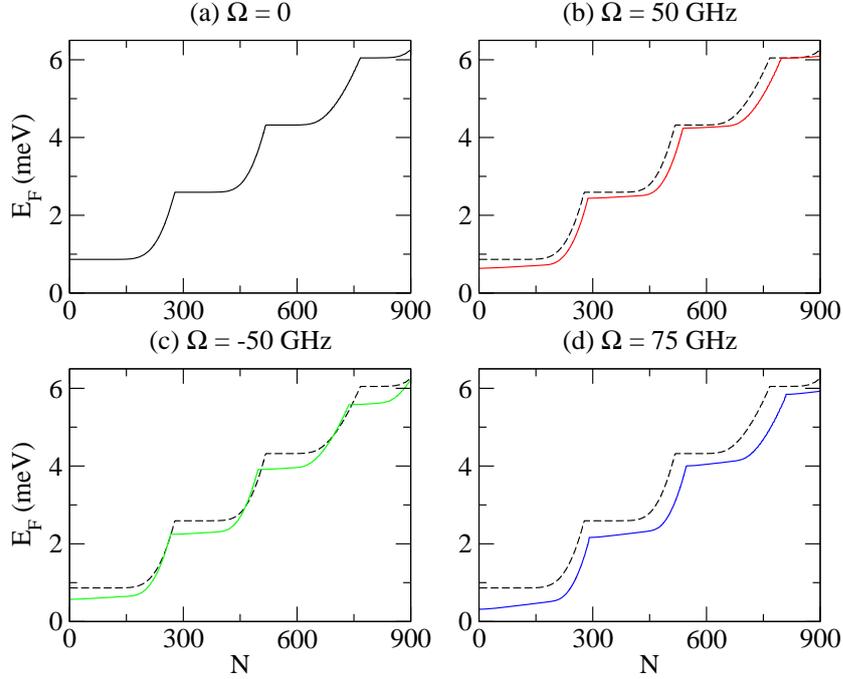


Figura 50 – Energia de Fermi de um anel 2D (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em função do número de elétrons. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d), correspondem ao caso em que $\Omega = 0$.

Na Fig. 51, mostramos o comportamento da energia de Fermi em função do campo magnético para o caso em que há $N = 800$ elétrons no anel. Podemos observar que, em alguns intervalos de B , a energia de Fermi cresce linearmente. Nesses intervalos, a energia de Fermi está em um nível de Landau. Por outro lado, quando a energia de Fermi decresce continuamente após atingir um máximo, corresponde ao caso em que a energia de Fermi está nos estados de borda do sistema. Quando comparamos o comportamento da energia de Fermi descrito na Fig. 51 com o da Fig. 5, concluímos que a presença de estados de borda elimina as mudanças abruptas da energia de Fermi.

Até o momento não levamos em conta o efeito do fluxo magnético de AB no sistema. O fluxo pode ser incorporado diretamente aos resultados obtidos através da substituição $m \rightarrow m - l$ na expressão para as energias. Novamente, podemos inferir a corrente persistente transportada pelos estados eletrônicos do anel usando a relação de Byers-Yang

$$I_{\nu,m} = -\frac{\partial E_{\nu,m}}{\partial \Phi} = \frac{1}{\phi_0} \frac{\partial E_{\nu,m}}{\partial m}. \quad (8.17)$$

onde $E_{\nu,m}$ é dado pela Eq. (8.14). Como apontado por Halperin [109], a quantidade $|\partial E_{\nu,m}/\partial m|$ é justamente a energia de separação entre os estados adjacentes que estão

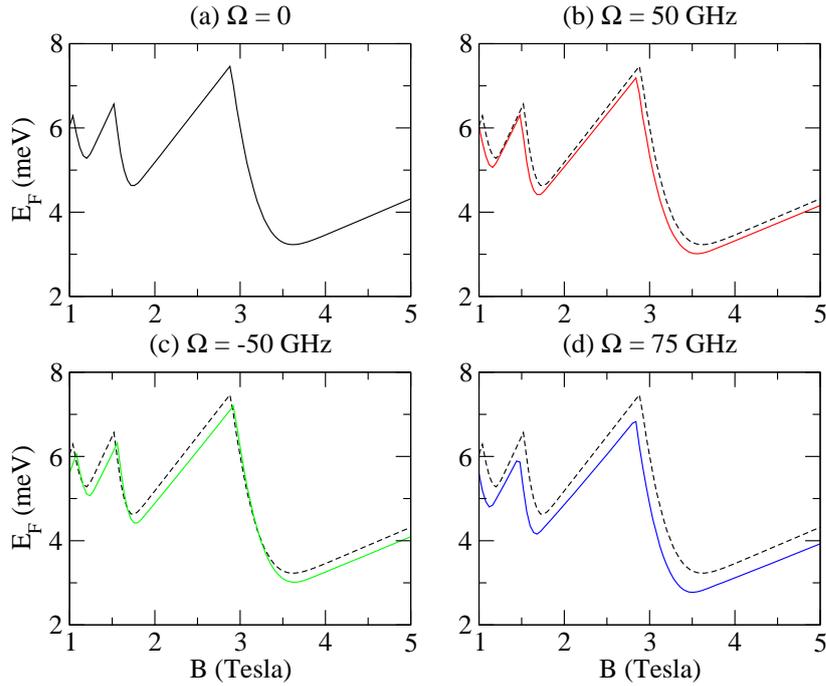


Figura 51 – Energia de Fermi de um anel 2D (veja o comentário sobre a Eq. (5.21)) em função do campo magnético. As linhas pretas tracejadas em (b), (c) e (d) correspondem ao caso em que $\Omega = 0$.

na mesma sub-banda. Assim, os estados da borda externa contribuem com uma corrente negativa, enquanto que os estados da borda interna contribuem com uma corrente positiva. Esse resultado ainda permanece quando a amostra está rotacionando, tal que $\Omega \neq 0$. Por outro lado, para os estados localizados no interior da amostra anelar, a presença da rotação leva a comportamentos diferentes dos estados, como foi observado acima. As energias, nesse caso, são dadas pela Eq. (8.14), com $\nu = n$, sendo n um número natural. A corrente transportada por esses estados é dada por

$$I_{n,m} = -\frac{e}{4\pi} |\omega_1 - \omega_2|. \quad (8.18)$$

Se $\Omega = 0$, obtemos $I_{n,m} = 0$. De fato, as energias não dependem mais do número quântico m , ou seja, as energias correspondem aos níveis de Landau, e conseqüentemente, recuperamos os resultados obtidos por Halperin [109] e MacDonald [110]. Com $\Omega \neq 0$, temos uma quebra na degenerescência dos níveis de Landau e uma dependência das energias com o número quântico m , o que leva à corrente (8.18), a qual podemos notar que é a mesma para todos os estados localizados no interior do anel. Em outras palavras, podemos afirmar que devido aos efeitos de rotação, uma corrente quantizada é gerada pelos estados no interior da amostra. Na Tabela 2, listamos os valores da corrente quantizada no interior da amostra para alguns valores de Ω .

Outra característica importante que analisamos é o comportamento da corrente total em função do número de elétrons. Para $\Omega = 0$, a corrente persistente apresenta platôs

Ω (GHz)	$I_{n,m}$ (nA)
0	0
-50	-2.53×10^{-2}
50	-2.34×10^{-2}
75	-5.17×10^{-2}
100	-9.03×10^{-2}

Tabela 2 – Corrente transportada pelos estados no interior do anel (Eq. (8.18)) para $B = 1.0$ Tesla e alguns valores de Ω .

nos intervalos em que a energia de Fermi está localizada em um nível de Landau. De fato, a contribuição dos estados de Landau para a corrente é nula, de modo que a corrente total resulta da contribuição de todos os estados de borda abaixo da energia de Fermi. Neste caso, quando a energia de Fermi está em um nível de Landau a corrente é constante. Na região entre os platôs, que correspondem ao caso em que a energia de Fermi está em um estado da borda, a corrente deve oscilar em sinal e intensidade à medida que elétrons forem sendo adicionados até que o sistema atinja outro nível de Landau. Para $\Omega \neq 0$, não deve haver platôs. Os estados do centro passam a ter um comportamento semelhante aos estados da borda interna contribuindo com corrente negativa, como podemos verificar na Tab. 2. Assim, a corrente persistente deve oscilar para cada elétron adicionado.

9 Conclusão

Nesta tese, analisamos as propriedades eletrônicas, magnetização e corrente persistente em anéis mesoscópicos e pontos quânticos quando na presença de campos magnéticos externos. A investigação ocorreu em duas situações: quando os sistemas mesoscópicos apresentavam curvatura e quando os sistemas estavam em referenciais não inerciais. No primeiro caso, usamos a abordagem de da Costa para estudar o movimento de um elétron vinculado a uma superfície curva, o qual resultou no aparecimento de um potencial induzido pela geometria, enquanto no segundo caso, consideramos a presença de efeitos de rotação. A seguir, destacamos os principais resultados obtidos e os mais impactados pela curvatura e rotação.

No Cap. 5, estudamos as propriedades eletrônicas, a magnetização e a corrente persistente de um 2DEG em um anel quântico na métrica do cone e submetido a campos magnéticos externos. Obtivemos analiticamente as funções de onda e autovalores de energia. Foi demonstrado que a curvatura tem grande influência no espectro de energia do elétron em um anel quântico. Isso foi verificado devido ao aumento da energia dos estados, bem como um aumento na separação entre sub-bandas vizinhas. Como consequência imediata desses resultados observou-se que as sub-bandas eram despovoadas mais rapidamente. Portanto, qualquer propriedade física que dependa dos resultados expostos acima, deve ter seu comportamento afetado pela curvatura. Esse é o caso da energia de Fermi, da magnetização e da corrente persistente. De fato, nas análises numéricas foi possível verificar os efeitos da curvatura nessas propriedades físicas. Por exemplo, vimos que os máximos das oscilações do tipo-dHvA são deslocados para campos magnéticos menores. Investigamos, também, os efeitos da temperatura nas propriedades físicas de um anel mesoscópico. Os resultados mostraram que a amplitude das oscilações diminui. As propriedades físicas de sistemas mesoscópicos são diretamente dependentes da temperatura, o qual é um resultado conhecido na literatura.

No ponto quântico, estudado no Cap. 6, verificamos que os efeitos da curvatura são ainda mais claros. Por exemplo, vimos que as oscilações do tipo-dHvA não são bem definidas. Além disso, a presença da curvatura média resulta na ausência do estado com $m = 0$. O efeito desse último resultado na energia de Fermi, na corrente persistente e na magnetização ficaram bastante evidentes nas análises numéricas. Portanto, a presença do potencial geométrico afetou as propriedades do ponto quântico. Esse resultado difere bastante do que foi observado no caso do anel. De fato, verificamos que no caso de um anel quântico, o potencial geométrico não produz nenhum efeito nas propriedades físicas estudadas no modelo. O argumento é que modelo de anel, o qual confina os elétrons a uma região finita, não permite que as partículas acessem a região $r = 0$ (o ápice do cone). Por

este motivo, não consideramos a interação dos elétrons com o potencial δ , o qual resultou da curvatura Gaussiana. Além disso, também verificamos que a influência da curvatura média nas energias, magnetização e corrente persistente é limitada pelo valor do parâmetro a_1 do potencial radial. Assim, para os valores experimentais que consideramos nas análises numéricas da corrente e da magnetização, nenhuma correção significativa da curvatura média pôde ser verificada nessas propriedades físicas do anel. Portanto, constatamos que o potencial geométrico é sensível à geometria do dispositivo.

No contexto de modelos físicos reais, o método proposto na Ref. [46] forneceu uma possível verificação experimental para o modelo estudado no Cap. 5. Nessa referência, os autores introduziram um método que permitiu retirar filmes finos de heteroestruturas padronizadas contendo um gás de elétrons bidimensionais de alta mobilidade. Por causa da flexibilidade do fino filme, é então possível transferir a heteroestrutura para um substrato cilíndrico e, assim, acessar as propriedades mesoscópicas de um gás de elétron em uma amostra curva. No nosso caso, teríamos um cone em vez de um cilindro. Isso configuraria uma fita sobre a superfície de um cone. Técnicas usuais podem, então, ser usadas para medir a corrente persistente. Uma maneira seria detectar o campo magnético gerado pela corrente circular usando um dispositivo supercondutor de interferência quântica (SQUID)¹ [30, 1].

A magnetização de um gás de elétrons bidimensional desempenha um importante papel no contexto de um motor quântico magnético movido por calor [167]. Assim, os efeitos de curvatura sobre as propriedades físicas dos modelos tratados aqui podem ser usados para fazer uma investigação sobre a otimização de tal motor em termos da extração de trabalho e eficiência. Além disso, a degenerescência tem consequências importantes sobre esse tipo de motor térmico quântico [168]. As considerações sobre esse fato que fizemos aqui podem impactar de maneira significativa.

Como especificado anteriormente, a segunda parte desta tese consistiu em estudar o problema de um elétron restrito um anel quântico rotacionando com velocidade angular constante Ω e na presença de um campo magnético uniforme perpendicular ao plano da amostra. Introduzimos a equação de Schrödinger que descreve o movimento da partícula e dividimos o estudo em duas etapas: (i) um modelo idealizado de anel 1D e (ii) um modelo de anel 2D. No caso de um anel 1D, verificamos que, dependendo do sentido da rotação, os estados são deslocados para menores ou maiores valores de l . Além disso, os estados apresentam energia mínima não nula. Na corrente persistente e magnetização, verificamos um deslocamento dos máximos das oscilações. Esse comportamento é resultante do deslocamento dos estados, como descrito acima, quando o anel está girando. Por outro lado, a energia mínima não nula dos estados não teve nenhuma influência sobre a corrente e a magnetização. De fato, a energia total do sistema foi simplesmente corrigida por uma

¹ Em inglês, "superconductive quantum interference device". Daí a sigla SQUID.

constante. Empregando a função de distribuição de Fermi, foi possível incluir os efeitos da temperatura na corrente persistente e na magnetização. Nesse caso, mostramos que ambas as propriedades físicas descrevem oscilações contínuas em função do fluxo magnético. Também verificamos que ocorre uma diminuição na amplitude das oscilações.

Para estudar as implicações físicas devido à rotação na estrutura eletrônica de um anel bidimensional, usamos um modelo que permitiu o surgimento de ambos os estados de Landau e de borda. Para uma compreensão melhor sobre o comportamento dos estados do anel 2D, analisamos o problema em duas etapas. Primeiro, abordamos o caso do movimento de um elétron em uma região sem o potencial de confinamento. Os autovalores de energia e suas respectivas funções de onda foram determinados. Por conveniência, escrevemos as energias em termos do potencial mínimo, o qual é derivado do termo que representa o potencial efetivo na equação de Schrödinger. Argumentamos que o potencial mínimo fornece informações importantes sobre a energia que o elétron adquire em um determinado estado do sistema, uma vez que ela depende do número quântico m , e das frequências ciclotrônica e de rotação. Um dos resultados mais importantes em nossa investigação revelou que a rotação elimina a degenerescência dos níveis de Landau. A segunda situação consistiu em analisar os efeitos da rotação sobre os estados eletrônicos de um anel mesoscópico imerso em um campo magnético uniforme levando em conta os efeitos de borda. Como o campo magnético foi descrito pelo calibre simétrico, usamos uma forma aproximada para a equação de onda, de modo que a equação diferencial radial resultante descrevesse o movimento do tipo oscilador harmônico. Isso nos permitiu usar resultados conhecidos na literatura para encontrar os autovalores e autofunções dos estados do anel 2D. Vimos que os estados de borda se comportam de maneira diferente dos estados localizados no interior do anel. Verificamos que os principais impactos devido aos efeitos de rotação aparecem nos estados no interior do anel. Argumentamos que a razão para que isso ocorra é a origem de uma corrente quantizada associada a esses estados, o que não ocorre no caso sem rotação. Não foi possível fazer uma análise numérica da corrente persistente ou mesmo da magnetização devido à forma como o espectro se manifesta [142].

Em resumo, verificamos que a rotação afeta as propriedades físicas dos modelos estudados. Esse fato mostra que sistemas em rotação podem ser úteis no estudo da física de anéis mesoscópicos. Portanto, esperamos contribuir para a compreensão dos efeitos de rotação em sistemas mesoscópicos. Foi possível pensar em aspectos que envolvessem a interação entre campos eletromagnéticos e rotação à luz da mecânica quântica de sistemas em baixas dimensões. Acreditamos que os modelos estudados possam ser úteis para estudar outros modelos constituídos por outras estruturas. Uma perspectiva futura relacionada a este problema é o estudo de anéis quânticos girando na presença de impurezas magnéticas.

Referências

- 1 HEINZEL, T. *Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures*. Weinheim - Germany: John Wiley /& Sons, 2006. Citado 8 vezes nas páginas 8, 18, 29, 41, 42, 46, 47 e 112.
- 2 JAIN, J. K. *Composite Fermions*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 8, 42 e 47.
- 3 BARNHAM, K.; VVEDENSKY, D. (Ed.). *Low-Dimensional Semiconductor Structures: Fundamentals and Device Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. Citado na página 18.
- 4 KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8^a. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006. Citado 5 vezes nas páginas 18, 29, 38, 39 e 41.
- 5 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica quântica*. 2^a. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011. Citado 5 vezes nas páginas 18, 35, 36, 38 e 93.
- 6 HARRISON, P. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. 3^a. ed. New Jersey: Wiley, 2009. Citado na página 18.
- 7 LIU, J. et al. Correlations between Aharonov-Bohm effects and one-dimensional subband populations GaAs/Al_xGa_{1-x}As in rings. *Physical Review B*, v. 48, p. 15148–15157, 1993. Citado na página 19.
- 8 DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. New York: Cambridge University Press, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 29.
- 9 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review*, v. 115, p. 485–491, 1959. Citado 3 vezes nas páginas 19, 23 e 28.
- 10 CASSÉ, M. et al. Temperature dependence of the Aharonov-Bohm oscillations and the energy spectrum in a single-mode ballistic ring. *Physical Review B*, v. 62, p. 2624–2629, 2000. Citado na página 19.
- 11 MILLIKEN, F. P. et al. Effect of partial phase coherence on Aharonov-Bohm oscillations in metal loops. *Physical Review B*, v. 36, p. 4465–4468, 1987. Citado na página 19.
- 12 WASHBURN, S. et al. Temperature dependence of the normal-metal Aharonov-Bohm effect. *Physical Review B*, v. 32, p. 4789–4792, 1985. Citado na página 19.
- 13 CHANDRASEKHAR, V. et al. Observation of Aharonov-Bohm electron interference effects with periods h/e and $h/2e$ in individual micron-size, normal-metal rings. *Physical Review Letters*, v. 55, p. 1610–1613, 1985. Citado na página 19.
- 14 TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Landau quantization and the Aharonov-Bohm effect in a two-dimensional ring. *Physical Review B*, v. 53, p. 6947–6950, 1996. Citado 4 vezes nas páginas 19, 20, 28 e 29.

- 15 JO, S. et al. Beating of Aharonov-Bohm oscillations in a closed-loop interferometer. *Physical Review B*, v. 76, p. 035110, 2007. Citado na página 19.
- 16 XIE, W. Photoionization cross section in a two-dimensional quantum ring: Aharonov-Bohm effect. *Superlattices and Microstructures*, v. 58, p. 94–100, 2013. Citado na página 19.
- 17 SANTANDER, C. G. .; ADAME, F. D. .; RÖMER, R. A. Excitonic Aharonov-Bohm effect in a two-dimensional quantum ring. *Physical Review B*, v. 84, p. 235103, 2011. Citado na página 19.
- 18 CHAKRABORTY, T.; PIETILÄINEN, P. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. *Physical Review B*, v. 50, p. 8460–8468, 1994. Citado 3 vezes nas páginas 20, 28 e 38.
- 19 TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model. *Semiconductor Science and Technology*, v. 11, p. 1635–1641, 1996. Citado 6 vezes nas páginas 20, 28, 55, 56, 59 e 61.
- 20 TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. *Physical Review B*, v. 60, p. 5626–5635, 1999. Citado 13 vezes nas páginas 20, 21, 25, 26, 28, 55, 68, 72, 76, 78, 86, 87 e 90.
- 21 BAKKE, K.; FURTADO, C. On the confinement of a Dirac particle to a two-dimensional ring. *Physics Letters A*, v. 376, p. 1269–1273, 2012. Citado na página 20.
- 22 NETO, J. A.; BUENO, M. J.; FURTADO, C. Two-dimensional quantum ring in a graphene layer in the presence of a Aharonov-Bohm flux. *Annals of Physics*, v. 373, p. 273–285, 2016. Citado na página 20.
- 23 AVISHAI, Y.; KOHMOTO, M. Quantized persistent currents in quantum dot at strong magnetic field. *Physical Review Letters*, v. 71, p. 279–282, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 86.
- 24 FORMIN, V. M. (Ed.). *Physics of Quantum Rings*. Dresden - Germany: Springer, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 23.
- 25 KUSHWAHA, M. S. Plasmons and magnetoplasmons in semiconductor heterostructures. *Surface Science Reports*, v. 41, p. 1–416, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 79.
- 26 BIRD, J. P. (Ed.). *Electron transport in quantum dots*. New York - US: Springer, 2003. Citado 4 vezes nas páginas 20, 59, 79 e 80.
- 27 MAKSYM, P. A.; CHAKRABORTY, T. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Physical Review Letters*, v. 65, p. 108–111, 1990. Citado 4 vezes nas páginas 20, 27, 79 e 80.
- 28 BYERS, N.; YANG, C. N. Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders. *Physical Review Letters*, v. 7, p. 46–49, 1961. Citado 7 vezes nas páginas 20, 21, 28, 38, 62, 72 e 96.

- 29 BÜTTIKER, M.; IMRY, Y.; LANDAUER, R. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. *Physics Letters A*, v. 96, p. 365–367, 1983. Citado 4 vezes nas páginas 20, 28, 38 e 39.
- 30 MAILLY, D.; CHAPELIER, C.; BENOIT, A. Experimental observation of persistent currents in GaAs-AlGaAs single loop. *Physical Review Letters*, v. 70, p. 2020–2023, 1993. Citado 4 vezes nas páginas 21, 28, 68 e 112.
- 31 LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical Physics: Volume 5*. 3^a. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 98.
- 32 CHAKRABORTY, T. Nanoscopic quantum rings: A new perspective. In: KRAMER, B. (Ed.). *Advances in Solid State Physics*. Berlin (Germany): Springer, 2003. v. 43, p. 79–94. Citado 3 vezes nas páginas 21, 39 e 94.
- 33 CHEUNG, H.-F. et al. Persistent currents in small one-dimensional metal rings. *Physical Review B*, v. 37, p. 6050–6062, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.
- 34 CHEUNG, H.-F.; RIEDEL, E. K.; GEFEN, Y. Persistent currents in mesoscopic rings and cylinders. *Physical Review Letters*, v. 62, p. 587–590, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 39.
- 35 CHEUNG, H.-F.; GEFEN, Y.; RIEDEL, E. K. Isolated rings of mesoscopic dimensions. quantum coherence and persistent currents. *IBM Journal of Research and Development*, v. 32, p. 359–371, 1988. Citado na página 21.
- 36 YOSHIOKA, D.; FUKUYAMA, H. Orbital magnetism of two-dimensional electrons in confining potentials. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 61, p. 2368–2381, 1992. Citado na página 22.
- 37 PRINZ, V. et al. Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 6, p. 828–831, 2000. Citado na página 22.
- 38 PRINZ, V. Y. et al. A new technique for fabricating three-dimensional micro-and nanostructures of various shapes. *Nanotechnology*, v. 12, p. 399–402, 2001. Citado na página 22.
- 39 MENDACH, S. et al. Evenly curved two-dimensional electron systems in rolled-up hall bars. *Applied Physical Letters*, v. 88, p. 212113, 2006. Citado na página 22.
- 40 VOROB'EV, A. B. et al. Giant asymmetry of the longitudinal magnetoresistance in high-mobility two-dimensional electron gas on a cylindrical surface. *Physical Review B*, v. 75, p. 205309, 2007. Citado na página 22.
- 41 HOLOVATSKY, V. A.; VOITSEKHIVSKA, O. M.; YAKHNEVYCH, M. Y. M. Y. The effect of magnetic field and donor impurity on electron spectrum in spherical core-shell quantum dot. *Superlattices and Microstructures*, v. 116, p. 9–16, 2018. Citado na página 22.
- 42 LI, L. L. et al. Aharonov-Bohm oscillations in phosphorene quantum rings. *Physical Review B*, v. 95, p. 205426, 2017. Citado na página 22.

- 43 NAVA, A. et al. Transfer matrix approach to the persistent current in quantum rings: Application to hybrid normal-superconducting rings. *Physical Review B*, v. 94, p. 205125, 2016. Citado na página 22.
- 44 KIBIS, O. V.; SIGURDSSON, H.; SHELYKH, I. A. Aharonov-Bohm effect for excitons in a semiconductor quantum ring dressed by circularly polarized light. *Physical Review B*, v. 91, p. 235308, 2015. Citado na página 22.
- 45 TIAN, W.; DATTA, S. Aharonov-Bohm-type effect in graphene tubules: A Landauer approach. *Physical Review B*, v. 49, p. 5097–5100, 1994. Citado na página 22.
- 46 LORKE, A. et al. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Physical Review Letters*, v. 84, p. 2223–2226, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 112.
- 47 FURTADO, C.; ROSAS, A.; AZEVEDO, S. Landau quantization and curvature effects in a two-dimensional quantum dot. *Europhysics Letters*, v. 79, p. 57001, 2007. Citado na página 22.
- 48 JENSEN, H.; KOPPE, H. Quantum mechanics with constraints. *Annals of Physics*, v. 63, p. 586–591, 1971. Citado na página 22.
- 49 COSTA, R. C. T. d. Quantum mechanics of a constrained particle. *Physical Review A*, v. 23, p. 1982–1987, 1981. Citado 5 vezes nas páginas 22, 24, 48, 50 e 51.
- 50 COSTA, R. C. T. d. Constraints in quantum mechanics. *Physical Review A*, v. 25, p. 2893–2900, 1982. Citado na página 22.
- 51 BULAEV, D. V.; GEYLER, V. A.; MARGULIS, V. A. Effect of surface curvature on magnetic moment and persistent currents in two-dimensional quantum rings and dots. *Physical Review B*, v. 69, p. 195313, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 98.
- 52 LIANG, G.-H. et al. Pseudo-magnetic-field and effective spin-orbit interaction for a spin-1/2 particle confined to a curved surface. *Physical Review A*, v. 98, p. 062112, 2018. Citado na página 22.
- 53 WANG, Y.-L.; JIANG, H.; ZONG, H.-S. Geometric influences of a particle confined to a curved surface embedded in three-dimensional Euclidean space. *Physical Review A*, v. 96, p. 022116, 2017. Citado na página 22.
- 54 WANG, Y.-L. et al. Pauli equation for a charged spin particle on a curved surface in an electric and magnetic field. *Physical Review A*, v. 90, p. 042117, 2014. Citado na página 22.
- 55 WANG, Y.-L.; ZONG, H.-S. Quantum particle confined to a thin-layer volume: Non-uniform convergence toward the curved surface. *Annals of Physics*, v. 364, p. 68–78, 2016. Citado na página 22.
- 56 FERRARI, G.; CUOGHI, G. Schrödinger equation for a particle on a curved surface in an electric and magnetic field. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 230403, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 24.
- 57 CHANG, J.-Y.; WU, J.-S.; CHANG, C.-R. Exact Hamiltonians with Rashba and cubic Dresselhaus spin-orbit couplings on a curved surface. *Physical Review B*, v. 87, p. 174413, 2013. Citado na página 22.

- 58 GAIDIDEI, Y.; KRAVCHUK, V. P.; SHEKA, D. D. Curvature effects in thin magnetic shells. *Physical Review Letters*, v. 112, p. 257203, 2014. Citado na página 22.
- 59 ZHANG, Y.; VISHWANATH, A. Anomalous Aharonov-Bohm conductance oscillations from topological insulator surface states. *Physical Review Letters*, v. 105, p. 206601, 2010. Citado na página 22.
- 60 TEIXEIRA, R. et al. Schrödinger formalism for a particle constrained to a surface in \mathbb{R}_3^1 . *Journal of Mathematical Physics*, v. 60, p. 023502, 2019. Citado na página 22.
- 61 ATANASOV, V.; DANDOLOFF, R. Quantum-elastic bump on a surface. *European Journal of Physics*, v. 38, p. 015405, 2016. Citado na página 22.
- 62 SANTOS, F. et al. Geometric effects in the electronic transport of deformed nanotubes. *Nanotechnology*, v. 27, p. 135302, 2016. Citado na página 22.
- 63 SCHMIDT, A. G. M. Exact solutions of Schrödinger equation for a charged particle on a sphere and on a cylinder in uniform electric and magnetic fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 106, p. 200–207, 2019. Citado na página 22.
- 64 PANDEY, S. et al. Topological quantum pump in serpentine-shaped semiconducting narrow channels. *Physical Review B*, v. 97, p. 241103, 2018. Citado na página 22.
- 65 SZAMEIT, A. et al. Geometric potential and transport in photonic topological crystals. *Physical Review Letters*, v. 104, p. 150403, 2010. Citado na página 22.
- 66 ITOH, K. et al. Ultrafast processes for bulk modification of transparent materials. *MRS Bulletin*, v. 31, p. 620–625, 2006. Citado na página 23.
- 67 SOUZA, J. F. O. d.; RIBEIRO, C. A. d. L.; FURTADO, C. Aharonov-Bohm effect in graphene Möbius strips: an analytical treatment. *The European Physical Journal B*, v. 90, p. 1–7, 2017. Citado na página 23.
- 68 SOUZA, J. F. O. d.; FURTADO, C. On the confinement of massless dirac fermions in topological Möbius strips. *International Journal of Modern Physics B*, v. 30, p. 1650224, 2016. Citado na página 23.
- 69 KATANAEV, M. O. Geometric theory of defects. *Physics-Uspekh*, v. 48, p. 675–701, 2005. Citado na página 23.
- 70 KRÖNER, E. Continuum theory of defects. In: BALIAN, R.; KLÉMAN, M.; POIRIER J, P. (Ed.). *Les Houches, Session XXXV, 1980 - Physics of Defects*. North-Holland, Amsterdam: [s.n.], 1981. p. 215–315. Citado na página 23.
- 71 KATANAEV, M. O.; VOLOVICH, I. V. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, v. 216, p. 1–28, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.
- 72 MORAES, F. Condensed Matter Physics as a laboratory for gravitation and cosmology. *Brazilian Journal of Physics*, v. 30, p. 304–308, 2000. Citado na página 23.
- 73 KATANAEV, M. O. Geometric theory of defects. *Physics-Uspekh*, v. 48, p. 675–701, 2005. Citado na página 23.

- 74 FURTADO, C. et al. Landau levels in the presence of disclinations. *Physical Letters A*, v. 195, p. 90–94, 1994. Citado na página 23.
- 75 KLÉMAN, M. *Points, lignes, parois dans les fluides anisotropes et les solides cristallins*. Paris (France): Éditions de physique, 1977. Citado na página 23.
- 76 BUENO, M. J. et al. Quantum dot in a graphene layer with topological defects. *The European Physical Journal Plus*, v. 129, p. 201, 2014. Citado na página 23.
- 77 DE SOUZA, J. F. O.; DE LIMA RIBEIRO, C. A.; FURTADO, C. Bound states in disclinated graphene with Coulomb impurities in the presence of a uniform magnetic field. *Physics Letters A*, v. 378, p. 2317–2324, 2014. Citado na página 23.
- 78 BUENO, M. J.; FURTADO, C.; DE M. CARVALHO, A. M. Landau levels in graphene layers with topological defects. *The European Physical Journal B*, v. 85, p. 1–5, 2012. Citado na página 23.
- 79 AHARONOV, Y.; KAUFHERR, T. Quantum frames of reference. *Physical Review D*, v. 30, p. 368–385, 1984. Citado na página 23.
- 80 ANANDAN, J. Gravitational and rotational effects in quantum interference. *Physical Review D*, v. 15, p. 1448–1457, 1977. Citado na página 23.
- 81 HOLSTEIN, B. R. Variations on the Aharonov-Bohm effect. *American Journal of Physics*, v. 59, p. 1080–1085, 1991. Citado na página 23.
- 82 BEZERRA, V. B. Gravitational analogs of the Aharonov-Bohm effect. *Journal of Mathematical Physics*, v. 30, p. 2895–2899, 1989. Citado na página 23.
- 83 AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum aspects of the equivalence principle. *Foundations of Physics*, v. 3, p. 493–498, 1973. Citado na página 23.
- 84 AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum-related reference frames and the local physical significance of potentials. *Foundations of Physics*, v. 4, p. 75–81, 1974. Citado na página 23.
- 85 HARRIS, J. H.; SEMON, M. D. A review of the Aharonov-Carmi thought experiment concerning the inertial and electromagnetic vector potentials. *Foundations of Physics*, v. 10, p. 151–162, 1980. Citado na página 24.
- 86 SHEN, J.-Q.; HE, S.; ZHUANG, F. Aharonov-Carmi effect and energy shift of valence electrons in rotating C₆₀ molecules. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, v. 33, p. 35–38, 2005. Citado na página 24.
- 87 BARNETT, S. J. Gyromagnetic and electron-inertia effects. *Reviews of Modern Physics*, v. 7, p. 129–166, 1935. Citado na página 24.
- 88 ONO, M. et al. Barnett effect in paramagnetic states. *Physical Review B*, v. 92, p. 174424, 2015. Citado na página 24.
- 89 ARABGOL, M.; SLEATOR, T. Observation of the nuclear Barnett effect. *Physical Review Letters*, v. 122, p. 177202, 2019. Citado na página 24.
- 90 VIGNALE, G.; MASHHOON, B. Persistent current in a rotating mesoscopic ring. *Physics Letters A*, v. 197, n. 5, p. 444–448, 1995. Citado na página 24.

- 91 ROJO, A. G.; MERLIN, R. Persistent magnetic moment of rotating mesoscopic rings and cylinders. *Physical Review B*, v. 54, p. 1877–1879, 1996. Citado na página 24.
- 92 JOHNSON, B. L. Inertial forces and the Hall effect. *American Journal of Physics*, v. 68, p. 649–653, 2000. Citado na página 24.
- 93 FISCHER, U. R.; SCHOPOHL, N. Hall state quantization in a rotating frame. *Europhysics Letters*, v. 54, p. 502–507, 2001. Citado na página 24.
- 94 FILGUEIRAS, C.; BRANDÃO, J.; MORAES, F. Tuning the Hall conductivity with rotation. *Europhysics Letters*, v. 110, p. 27003, 2015. Citado na página 24.
- 95 FENNIMORE, A. M. et al. Rotational actuators based on carbon nanotubes. *Nature*, v. 424, p. 408–410, 2003. Citado na página 24.
- 96 BOURLON, B. et al. Carbon nanotube based bearing for rotational motions. *Nano Letters*, v. 4, p. 709–712, 2004. Citado na página 24.
- 97 NARENDAR, S.; GOPALAKRISHNAN, S. Nonlocal wave propagation in rotating nanotube. *Results in Physics*, v. 1, p. 17–25, 2011. Citado na página 24.
- 98 KRÁL, P.; SADEGHPOUR, H. R. Laser spinning of nanotubes: A path to fast-rotating microdevices. *Physical Review B*, v. 65, p. 161401, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 90.
- 99 SRIVASTAVA, D. A phenomenological model of the rotation dynamics of carbon nanotube gears with laser electric fields. *Nanotechnology*, v. 8, p. 186–192, 1997. Citado na página 24.
- 100 LOHRASEBI, A.; RAFII-TABAR, H. Computational modeling of an ion-driven nanomotor. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, v. 27, p. 116–123, 2008. Citado na página 24.
- 101 E. S. MOREIRA, J.; OLIVEIRA, E. S. Specific heat of a particle on the cone. *Physical Review A*, v. 73, p. 052105, 2006. Citado na página 25.
- 102 CAO, L. et al. Diamond-hexagonal semiconductor nanocones with controllable apex angle. *Journal of the American Chemical Society*, v. 127, p. 13782–13783, 2005. Citado na página 25.
- 103 MEDVID', A. The formation of nanocones on the surface of semiconductors by laser-induced self-assembly. In: VAINOS, N. A. (Ed.). *Laser Growth and Processing of Photonic Devices*. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2012, (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials). cap. 3, p. 85–112. Citado na página 25.
- 104 PEREIRA, L. F. C. et al. Effects of curvature on the electronic states of a two-dimensional mesoscopic ring. *arXiv: 1911.00134*. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 55.
- 105 PEREIRA, L. F. C. et al. Study of electronic properties, magnetization and persistent currents in a mesoscopic ring by controlled curvature. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 132, p. 114760, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 55.
- 106 PEREIRA, L. F. C. et al. Modifications of electron states, magnetization, and persistent current in a quantum dot by controlled curvature. *Annalen der Physik*, v. 531, p. 1900254, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 77.

- 107 WANG, Y.-L. et al. Geometric effects resulting from square and circular confinements for a particle constrained to a space curve. *Physical Review A*, v. 97, p. 042108, 2018. Citado na página 26.
- 108 PEREIRA, L. F. C.; CUNHA, M. M.; SILVA, E. O. A toy model describing noninertial effects on electronic states, persistent current and magnetization of a 1D quantum ring. *arXiv:1912.02790v1*. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 90.
- 109 HALPERIN, B. I. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Physical Review B*, v. 25, p. 2185–2190, 1982. Citado 5 vezes nas páginas 26, 28, 106, 108 e 109.
- 110 MACDONALD, A. H.; STŘEDA, P. Quantized Hall effect and edge currents. *Physical Review B*, v. 29, p. 1616–1619, 1984. Citado 4 vezes nas páginas 26, 28, 106 e 109.
- 111 MAKSYM, P. A.; CHAKRABORTY, T. Effect of electron–electron interactions on the magnetization of quantum dots. *Physical Review B*, v. 45, p. 1947–1950, 1992. Citado na página 27.
- 112 MAGNÚSDÓTTIR, I.; GUDMUNDSSON, V. Magnetization of noncircular quantum dots. *Physical Review B*, v. 61, p. 10229–10234, 2000. Citado na página 27.
- 113 VASILE, G.; GUDMUNDSSON, V.; MANOLESCU, A. Orbital and spin magnetization of a confined electronic system in the transition between a quantum dot and a ring. In: LONG, A. R.; DAVIES, J. H. (Ed.). *15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, August 2002*. Bristol - Philadelphia: IOP, 2003. (Institute of Physics Conference Series 171). Citado na página 27.
- 114 ALDEA, A. et al. Orbital magnetization of single and double quantum dots in a tight-binding model. *Physical Review B*, v. 67, p. 035324, 2003. Citado na página 27.
- 115 AVETISYAN, S.; CHAKRABORTY, T.; PIETILÄINEN, P. Magnetization of interacting electrons in anisotropic quantum dots with Rashba spin-orbit interaction. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 81, p. 334–338, 2016. Citado na página 27.
- 116 LÉVY, L. P. et al. Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents. *Physical Review Letters*, v. 64, p. 2074–2077, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 39.
- 117 AVISHAI, Y.; HATSUGAI, Y.; KOHMOTO, M. Persistent currents and edge states in a magnetic field. *Physical Review B*, v. 47, p. 9501–9512, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 28, 39 e 90.
- 118 AQUINO, N.; CASTAÑO, E.; LEY-KOO, E. The Aharonov-Bohm effect on quantum antidot Landau states. *Chinese Journal of Physics*, v. 41, p. 276–287, 2003. Citado na página 29.
- 119 KUSHWAHA, M. S. Magneto-optical absorption in semiconducting spherical quantum dots: Influence of the dot-size, confining potential, and magnetic field. *AIP Advances*, v. 4, p. 127151, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 68.

- 120 SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2. São Paulo (Brasil): EDUSP, 2008. Citado na página 29.
- 121 FOCK, V. Bemerkung zur quantelung des harmonischen oszillators im magnetfeld. *Zeitschrift für Physik*, v. 47, p. 446–448, 1928. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 79.
- 122 DINGLE, R. B.; BRAGG, W. L. Some magnetic properties of metals I. General introduction, and properties of large systems of electrons. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 211, p. 500–516, 1952. Citado na página 31.
- 123 LANDAU, L. Diamagnetismus der metalle. *Zeitschrift für Physik*, v. 64, p. 629–637, 1930. Citado na página 31.
- 124 IHN, T. *Semiconductor Nanostructures: Quantum states and electronic transport*. Oxford: Oxford University Pres, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 31, 36, 42 e 58.
- 125 COHEN-TANNOUJJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. Paris: Hermann, 1991. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.
- 126 LEMOS, N. A. *Mecânica Analítica*. 2. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2013. Citado na página 32.
- 127 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J.; DAHMEN, S. *Mecânica quântica moderna*. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013. Citado na página 34.
- 128 FRANCO, D. H.; HELAYËL-NETO, J. A. Introdução às teorias de gauge: um curso prático. Notas de Aula. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 35.
- 129 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. Philadelphia: Harcourt Brace College, 1976. Citado na página 38.
- 130 FENG, D.; JIN, G. *Introduction to Condensed Matter Physics*. Singapore: World Scientific, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 46.
- 131 BÜTTIKER, M. Flux-sensitive effects in normal metal loops. *Annals of the New York Academy of Sciences*, v. 480, n. 1, p. 194–209, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 41.
- 132 LENT, C. S. Edge states in a circular quantum dot. *Physical Review B*, v. 43, p. 4179–4186, 1991. Citado na página 41.
- 133 KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical Review Letters*, v. 45, p. 494–497, 1980. Citado na página 42.
- 134 FOWLER, A. B. et al. Magneto-oscillatory conductance in silicon surfaces. *Physical Review Letters*, v. 16, p. 901–903, 1966. Citado na página 42.
- 135 TAYLOR, P. L.; HEINONEN, O. *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. Citado na página 42.
- 136 MIURA, N. *Physics of Semiconductors in High Magnetic Fields*. New York: Oxford University Press, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 46.

- 137 TSUI, D. C.; STORMER, H. L.; GOSSARD, A. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Physical Review Letters*, v. 48, p. 1559–1562, 1982. Citado na página 42.
- 138 COEY, J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. Citado na página 46.
- 139 PATTERSON, J.; BAILEY, B. C. *Solid-State Physics: Introduction to the Theory*. Berlin: Springer-Verlag, 2007. Citado na página 46.
- 140 BOGACHEK, E. N.; GOGADZE, G. A. Flux quantization' type of oscillation effects in a normal metal. *Zhurnal Éksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, v. 63, p. 1839–1848, 1972. Citado na página 47.
- 141 SIVAN, U.; IMRY, Y. de haas-van alphen and aharonov-bohm-type persistent current oscillations in singly connected quantum dots. *Physical Review Letters*, v. 61, p. 1001–1004, 1988. Citado na página 47.
- 142 MEIR, Y.; ENTIN-WOHLMAN, O.; GEFEN, Y. Magnetic-field and spin-orbit interaction in restricted geometries: Solvable models. *Physical Review B*, v. 42, p. 8351–8360, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 113.
- 143 HAGEN, C. R.; PARK, D. K. Relativistic Aharonov-Bohm Coulomb problem. *Annals of Physics*, v. 251, p. 45–63, 1996. Citado na página 48.
- 144 ENCINOSA, M. Coupling curvature to a uniform magnetic field: An analytic and numerical study. *Physical Review A*, v. 73, p. 012102, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 52.
- 145 STOKER, J. J. *Differential Geometry*. [S.l.]: John Wiley /& Sons, 1989. Citado na página 51.
- 146 STRUIK, D. J. *Lectures on Classical Differential Geometry*. 2. ed. New York: Dover, 1988. Citado na página 51.
- 147 DO CARMO, M. P. *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc, 1976. Citado na página 51.
- 148 SILVA, E. O. et al. Quantum motion of a point particle in the presence of the Aharonov-Bohm potential in curved space. *Annals of Physics*, v. 362, p. 739–751, 2015. Citado na página 52.
- 149 GONÇALVES, M. B.; FLEMMING, D. M. *Cálculo C: funções vetoriais, integrais curvilíneas, integrais de superfície*. 3. ed. São Paulo: Makron Books, 2004. Citado na página 53.
- 150 FILGUEIRAS, C.; MORAES, F. On the quantum dynamics of a point particle in conical space. *Annals of Physics*, v. 323, p. 3150–3157, 2008. Citado na página 53.
- 151 FILGUEIRAS, C.; SILVA, E. O.; ANDRADE, F. M. Nonrelativistic quantum dynamics on a cone with and without a constraining potential. *Journal of Mathematical Physics*, v. 53, p. 122106, 2012. Citado na página 53.

- 152 DE M. CARVALHO, A. M.; SÁTIRO, C.; MORAES, F. Aharonov-Bohm-like effect for light propagating in nematics with disclinations. *Europhysics Letters*, v. 80, p. 46002, 2007. Citado na página 53.
- 153 REED, M.; SIMON, B. *Methods of Modern Mathematical Physics. II. Fourier Analysis, Self-Adjointness*. [S.l.]: Elsevier, 1975. v. 2. Citado na página 57.
- 154 ANDRADE, F. M.; SILVA, E. O.; PEREIRA, M. Physical regularization for the spin-1/2 Aharonov-Bohm problem in conical space. *Physical Review D*, v. 85, p. 041701, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 57, 78 e 79.
- 155 ANDRADE, F. M.; SILVA, E. O.; PEREIRA, M. On the spin-1/2 Aharonov-Bohm problem in conical space: Bound states, scattering and helicity nonconservation. *Annals of Physics*, v. 339, p. 510–530, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 79.
- 156 FUHRER, A. et al. Energy spectra of quantum rings. *Nature*, v. 413, p. 822–825, 2001. Citado na página 58.
- 157 TAN, W.-C.; INKSON, J. C.; SRIVASTAVA, G. P. A microscopic study of Landau level states in quantum wires. *Semiconductor Science and Technology*, v. 9, p. 1305–1315, 1994. Citado na página 59.
- 158 KOUWENHOVEN, L. P.; AUSTING, D. G.; TARUCHA, S. Few-electron quantum dots. *Reports on Progress in Physics*, v. 64, p. 701–736, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 59, 79 e 80.
- 159 HAGEN, C. R. Aharonov-Bohm scattering of particles with spin. *Physical Review Letters*, v. 64, p. 503–506, 1990. Citado na página 78.
- 160 MILTON, A.; STEGUN, I. A. (Ed.). *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York: Dover Publications, 1965. v. 55. (National Bureau of Standards Applied Mathematics Series, v. 55). Citado 2 vezes nas páginas 78 e 103.
- 161 REIMANN, S. M.; MANNINEN, M. Electronic structure of quantum dots. *Reviews Modern Physics*, v. 74, p. 1283–1342, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 79 e 80.
- 162 NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de física básica: Mecânica*. 5. ed. São Paulo: Blucher, 2013. v. 1. Citado na página 91.
- 163 RIZZI, G.; RUGGIERO, M. L. (Ed.). *Relativistic in Rotating Frames: Relativistic Physics in Rotating Reference Frames*. [S.l.]: Springer Netherlands, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 91 e 92.
- 164 MERZBACHER, E. *Quantum Mechanics*. 3. ed. New Jersey: John Wiley /& Sons, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 100 e 106.
- 165 MEI, W. N.; LEE, Y. C. Harmonic oscillator with potential barriers-exact solutions and perturbative treatments. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, p. 1623–1632, 1983. Citado na página 106.
- 166 MORSE PHILIP M, a. F. *Methods of Theoretical Physics*. Boston: McGraw-Hill, 1953. Citado na página 106.

-
- 167 MUÑOZ, E.; PEÑA, F. J. Magnetically driven quantum heat engine. *Physical Review E*, v. 89, p. 052107, 2014. Citado na página 112.
- 168 PEÑA, F. J. et al. Magnetic engine for the single-particle Landau problem. *Entropy*, v. 19, p. 639, 2017. Citado na página 112.