

Angel Eduardo Obispo Vásquez

**Anomalias e números fermiônicos  
induzidos em grafeno  
com deformações**

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia  
do Campus de Guaratinguetá, Universidade  
Estadual Paulista, como parte dos requisi-  
tos para a obtenção do Título de Doutor em  
Física na área de Partículas e Campos

**Orientador: Prof. Dr. Marcelo B. Hott.**

Guaratinguetá

2016

V335a Vázquez, Angel Eduardo Obispo  
Anomalias e números fermiônicos induzidos em grafeno com  
deformações / Angel Eduardo Obispo Vázquez – Guaratinguetá, 2016.  
84 f. : il.  
Bibliografia : f. 79-82

Tese (doutorado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de  
Engenharia de Guaratinguetá, 2016.  
Orientadora: Prof. Dr. Marcelo Batista Hott

1. Fermions 2. Grafeno 3. Dirac, Equações de 4. Teoria quântica de  
campos I. Título

CDU 530.145 (043)

**ATA DA DEFESA PÚBLICA DA TESE DE DOUTORADO DE ANGEL EDUARDO OBISPO VASQUEZ, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, DA FACULDADE DE ENGENHARIA.**

Aos 17 dias do mês de fevereiro do ano de 2016, às 09:00 horas, no(a) Sala de Videoconferência - Polo Computacional - Bloco III, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. MARCELO BATISTA HOTT do(a) Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Prof. Dr. DENIS DALMAZI do(a) Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Prof. Dr. ALVARO DE SOUZA DUTRA do(a) Departamento de Física e Química / Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Prof. Dr. FABRÍCIO AUGUSTO BARONE RANGEL do(a) , Prof. Dr. HUMBERTO BELICH JUNIOR do(a) , sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da TESE DE DOUTORADO de ANGEL EDUARDO OBISPO VASQUEZ, intitulada **Anomalias e números fermiônicos induzidos em grafeno com deformações**. Após a exposição, o discente foi arguido oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: APROVADO . Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

  
Prof. Dr. MARCELO BATISTA HOTT

  
Prof. Dr. DENIS DALMAZI

  
Prof. Dr. ALVARO DE SOUZA DUTRA

  
Prof. Dr. FABRÍCIO AUGUSTO BARONE RANGEL

  
Prof. Dr. HUMBERTO BELICH JUNIOR

## **DADOS CURRICULARES**

### **ANGEL EDUARDO OBISPO VÁSQUEZ**

**NASCIMENTO** 21.09.1984 / LIMA-PERÚ

**FILIAÇÃO** Sergio Eduardo Obispo Suchero  
Elsa del Pilar Vásquez Pizán

2003 / 2008 Curso de Graduação - Bacharelado em Física  
Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas  
Universidad Nacional del Callao - UNAC, Lima Perú.

2010 / 2012 Curso de Pós-Graduação em Física, nível Mestrado,  
na Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá  
Universidade Estadual Paulista - UNESP, Guaratinguetá-SP Brasil.

2012 / 2016 Curso de Pós-Graduação em Física, nível Doutorado,  
na Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá  
Universidade Estadual Paulista - UNESP, Guaratinguetá-SP Brasil.

## AGRADECIMENTOS

Que bom ter uma razão para estender esse abraço, esboçar um sorriso e dizer-lhes: "Obrigado, muito obrigado", por estar presente em minha vida e gerar, junto comigo, esta tese que é fruto do esforço e dedicação...

- A meu padre Eduardo, por sua sabedoria baseado na sua experiência.
- A minha mãe Elsa, por sua ternura infinita e apoio incondicional.
- A minha irmã Bonny, por sua força e caráter que me fazem sentir orgulhoso.
- A meu orientador Marcelo, um grande profissional, um grande amigo, que deu o melhor de si para eu poder dar o melhor de mim.
- Aos professores do grupo de partículas e campos da Unesp-Campus de Guaratinguetá: Professores Drs.: Antonio S. de Castro, Alvaro de Souza Dutra, Denis Dalmazi, Julio Marny Hoff da Silva e Marcelo B. Hott, os quais me aconselharam e me orientaram nesta etapa do doutorado.
- Aos funcionários do curso de pós-graduação: Regina, Christina e Renata.
- A meus conterrâneos peruanos: Carloncho, Luis Arroyo, Alonso, Mariela, Freddy, Luis Benito, Augusto, Elver, Andres, Omar, Daniel, Carlos e Gretta, pela confiança e amizade.
- A meus grandes amigos brasileiros: Ricardo, Gabriel, Elias, Helton, Wagner, Alessandro e Rodolfo.
- Agradeço esta grande universidade e este grande país que me acolhe e me faz sentir em casa.

Que bom ter sempre razões para agradecer a Deus Nosso Senhor...Obrigado Senhor por estar do meu lado nessa luta constante, nesse esforço contínuo que se reflete nesta tese que pretende ajudar a quem precise dela.

Obrigado Bom Padre!....Contigo do meu lado, quem será contra mim.

Este trabalho contou com o apoio financeiro da CAPES.

Esta tese está dedicada aos meus pais  
pelo grande apoio e amor que sempre me mostraram.

A alegria está na luta,  
na tentativa,  
no sofrimento envolvido  
e não na vitória propriamente dita...

**Mahatma Gandhi.**



OBISPO, A. E. **Anomalias e números fermiônicos induzidos em grafeno com deformações**. 2016. 84 f. Tese de Doutorado – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2016.

## RESUMO

Desde aproximadamente o final da década de 1970 efeitos quânticos e topológicos em sistemas da matéria condensada que são mostrados ocorrer a nível teórico em teoria quântica de campos têm atraído a atenção de físicos. Neste contexto, o grafeno representa uma das maiores vertentes de pesquisa dentro dos estudos da ciência dos materiais. O fato das excitações eletrônicas de baixa energia serem descritas por fermions de Dirac, estimulou uma relação frutífera entre a matéria condensada e a física de altas energias, fornecendo cenários propícios para o aparecimento de novos e exóticos fenômenos que são de grande interesse na física da matéria condensada atual. A presente tese aborda particularmente dois tópicos fundamentais da teoria quântica de campos: As Anomalias quânticas e o Fracionamento do número fermiônico. Especificamente, estamos interessados na realização de ambos fenômenos em redes de grafeno com deformações. No grafeno, um potencial vector de gauge axial surge como produto de deformações locais da rede, na forma de defeitos topológicos ou corrugações suaves. Analisaremos a influência desses campos pseudomagnéticos nos estados eletrônicos para uma partícula, quando interagem com um campo magnético externo, considerando diferentes configurações para esses campos. Estudamos o papel que desempenham os estados de modo-zero na indução de um número fermiônico fracionário e sua conexão com a anomalia de paridade.

**PALAVRAS-CHAVE:** Grafeno, Equação de Dirac, Modos-zero, Defeitos topológicos, Fracionamento do número fermiônico, Anomalias quânticas.

OBISPO, A. E. **Anomalies and induced fractional fermion number in strain-graphene**. 2016. 84 f. Thesis (Doctor in Physics) – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2016.

## ABSTRACT

Since approximately the late 1970s, topological quantum effects in condensed matter systems that are shown to occur at a theoretical level in quantum field theory have attracted the attention of physicists. In this context, the graphene is one of the major lines of research within the studies of materials science. The fact that the electronic excitations of low energy are described by Dirac fermions, stimulating a fruitful relationship between condensed matter and high energy physics, providing favorable scenarios for the arising of new and exotic phenomena which are of great interest in the current condensed-matter physics. This thesis addresses particularly two key topics of quantum field theory: Quantum anomalies and the fermion number fractionalization. Specifically, we are interested in performing both phenomena in deformed graphene lattice. In graphene, an axial vector potential arises as the result of local deformations on the lattice, as topological defects or soft corrugations. We analyze the influence of these pseudo-magnetic fields on the one-particle states, when interacting with a background magnetic field, for different configurations of the fields. We study the role played by zero-mode states in fractional fermion number induced and its connection with the anomaly of parity.

**KEYWORDS:** Graphene, Dirac equation, Zero modes, Topological defects, Fermion number fractionalization, Quantum anomalies.

# Lista de Figuras

2.1	Os diferentes tipos de hibridações do carbono [27].: (a) Hibridação $sp^1$ , (b) Hibridação $sp^2$ e (c) Hibridação $sp^3$ . . . . .	19
2.2	Imagem de uma bicapa de grafite. . . . .	20
2.3	Imagem da estrutura atômica do diamante [27].. . . .	21
2.4	Imagem da estrutura atômica do fulereno (esquerda) e o nanotubo de carbono (direita). . . . .	22
2.5	Estrutura cristalina do grafeno construído como uma superposição de duas subredes triangular $A$ e $B$ , com vetores-base $\vec{a}_i$ para a rede $A$ e vetores $\vec{s}_i$ conectando $A$ com $B$ . . . . .	23
2.6	Rede recíproca do Grafeno formada pelos vetores $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ . A região colorida representa a 1 <sup>a</sup> zona de Brillouin . . . . .	24
2.7	Estrutura de banda do Grafeno obtida a partir da aproximação "Tight Binding ". . . . .	26
3.1	Direita: Defeito pentagonal na rede de grafeno. Esquerda: Procedimento de corte e colado na rede plana de grafeno para formar dito defeito. . . . .	32
3.2	Diagramas da polarização do vácuo . . . . .	48
4.1	Disclinação isolada (átomos azuis) do tipo pentagonal em uma rede de grafeno na presença de um campo magnético externo (pontos vermelhos) apontando em forma perpendicular à página. . . . .	57
4.2	Valores absolutos de (a) densidade superficial de $\rho_+$ ; (b) densidade superficial $\rho_-$ ; (c) densidade superficial neta (densidade de número de vale neto) $\rho = \rho_+ - \rho_-$ como funções da coordenada $r$ (em unidades adimensionais). . . . .	65

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>Grafeno: Um cristal bidimensional</b>	<b>17</b>
2.1	Formas alotrópicas do carbono . . . . .	18
2.2	O grafeno . . . . .	22
2.2.1	Modelo contínuo de baixa energia . . . . .	26
2.3	Gaps de energia no grafeno . . . . .	28
2.3.1	Gap induzido por um potencial químico . . . . .	29
2.3.2	Massa de Haldane . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Férmions de Dirac em grafeno com deformações</b>	<b>31</b>
3.1	Defeitos topológicos em grafeno: Campos de gauge induzidos por disclinações	32
3.1.1	Modos-zero e fracionamento da carga fermiônica induzidos por disclinações: Vórtices pseudomagnéticos . . . . .	35
3.1.2	Modos-zero e fracionamento da carga fermiônica induzidos por vórtices magnéticos . . . . .	39
3.1.3	Modos-zero e números fermiônicos induzidos por vórtices magnéticos e pseudomagnéticos . . . . .	41
3.2	Níveis de Landau e cargas induzidas em campos magnéticos uniformes	43
3.3	Cálculo do número fermiônico via abordagem perturbativa . . . . .	48
3.4	Campos de gauge induzidos por deformações elásticas . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Efeitos de uma disclinação isolada em grafeno em presença de um campo magnético uniforme</b>	<b>56</b>
4.1	Estados fermiônicos e espectro de energia . . . . .	56
4.2	Número de vale induzido . . . . .	62
4.3	Polarização de spin induzida . . . . .	66
4.4	Cálculo analítico da densidade local de estados . . . . .	69
4.4.1	Método da Função de Green . . . . .	69

<b>5</b>	<b>Conclusões e Comentários</b>	<b>77</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>78</b>
<b>6</b>	<b>Apêndice A</b>	<b>83</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Nesta última década, os chamados materiais de Dirac representaram uma grande vertente de pesquisa (teórica e experimental) dentro do estudo das ciências dos materiais. O fato das excitações eletrônicas de baixa energia nesses materiais serem descritas por fermions de Dirac, estimulou uma relação frutífera entre a matéria condensada e a física de altas energias, fornecendo cenários propícios para o aparecimento de novos e exóticos fenômenos que são de grande interesse na física da matéria condensada atual. Particularmente, desde sua descoberta em 2004 [1], o grafeno (o material mais proeminente dentro deste grupo) tem mostrado imediatamente uma rica variedade de interessantes propriedades eletrônicas e estruturais. O grafeno é um cristal bidimensional composto unicamente de átomos de carbono dispostos em anéis hexagonais (tipo colméia); sendo denominado como o “material mais fino do universo”, o qual exhibe alta qualidade cristalina, transporte elétrico balístico em baixas temperaturas e várias outras propriedades eletrônicas que não demoraram em ser analisadas e divulgadas [2]-[4].

Um dos aspectos mais interessantes do grafeno, do ponto de vista teórico, é a estreita relação com a electrodinâmica quântica (EDQ) e outras ideias da teoria quântica de campos (TQC) [5]-[7]. Tal conexão surge devido ao fato de que a relação de dispersão é linear perto dos pontos de Dirac (também chamados de "vales", e são pontos onde a energia é nula), que implica que as excitações de baixa energia sejam descritas por uma equação de Dirac sem massa em 2 dimensões do espaço, com uma velocidade  $v$  muito menor da velocidade da luz (experimentalmente,  $v \sim c/300$ ). O surgimento de anomalias quânticas em redes hexagonais tipo grafeno é um claro exemplo desta conexão [5], como será comentado a seguir.

Lembremos que uma anomalia em teoria quântica de campos ocorre quando uma simetria da teoria (lagrangiano) clássica é quebrada em nível quântico. As consequências da existência de anomalias quânticas foram fundamentais para o desenvolvimento do modelo padrão que explica as interações entre partículas elementares. Por exemplo, a

chamada anomalia quiral quântica, descoberta pelo físicos teóricos Adler, Bell e Jackiw em 1969 [8] permitiu explicar certos processos entre partículas subatômicas tais como o fato de que o pión neutro possa se desintegrar em dois fótons [9]. Por outro lado, um antecedente mais relevante para o contexto desta tese é encontrado em [5]. Neste trabalho, Semenoff mostrou que a anomalia de paridade, um fenômeno que foi mostrado ocorrer na EDQ em 2+1 dimensões do espaço-tempo, poderia ser simulado em estruturas tipo colmeia similares ao grafeno (Nitreto de Boro, por exemplo), com duas espécies de átomos (um tipo para cada sub-rede). Desta forma, existe uma diferença de energia entre elétrons localizados sobre distintos tipos átomos que implica o surgimento de um "termo de massa" que quebra paridade no Hamiltoniano efetivo da teoria de campo, e que seria o eventual responsável de uma corrente fermiônica anômala induzida. De qualquer forma, em [5] foi sugerido que uma carga fracionária poderia ser induzida em uma rede similar àquela, porém composta de somente um tipo de átomo (caso do grafeno), assim teríamos ainda dois tipos de férmions, devido à decomposição em duas sub-redes, mas esses são sem massa, pois pertencem ao mesmo tipo de átomo. Desta forma, surgiu um grande número de trabalhos abordando questões fundamentais da TQC, principalmente sobre anomalias quânticas [5, 6] e mais recentemente, sobre o fracionamento do número fermiônico [10, 11, 12, 13, 14, 15].

Uma realização de fracionamento do número (carga) fermiônico(a) em redes planares de grafeno por meio de um campo escalar complexo somente foi proposta em [10]; de forma similar ao mecanismo de fracionamento que ocorre em poliacetileno [16] e com a vantagem de não ter a simetria de reversão-temporal quebrada, que é o que ocorre no fenômeno do fracionamento do número fermiônico por meio de um campo magnético proposto em [5]. O campo escalar em [10] tem uma estrutura do tipo vórtice, como aqueles exibidos em modelos com quebra espontânea de simetria de calibre local e consequente formação de vórtices no caso planar (em 3+1 dimensões este mecanismo é o consagrado modelo de Higgs); os chamados vórtices de Nielsen-Olesen-Abrikosov [17]. Em redes hexagonais tipo colmeia, esses campos escalares desempenham o papel de distorção da rede, também chamada de distorção de Kekulé. Baseando-se nos modelos de formação de vórtices, os resultados de [10] foram estendidos em uma teoria mais geral, dita uma teoria de gauge quiral para o grafeno [11], e mostra-se que nem a estrutura espinorial do modo-zero fermiônico (excitações fermiônicas de energia nula) nem a carga fracionária são modificadas pela adição de um potencial vetorial de gauge que se acopla de maneira quiral aos férmions.

De fato, campos magnéticos fictícios em grafeno tem sido muito frutífera tanto experimental quanto teoricamente; como por exemplo, no modelamento de corrugações e deformações elásticas e no estudo das influências que defeitos topológicos poderiam ocasionar sobre as propriedades eletrônicas do grafeno [18]-[23]; na realização experimental

dos níveis de Landau em campos pseudomagnéticos muito intensos (de até 300 T) devido a tensões no grafeno [24]; e na possibilidade de observar, através de um microscópio de tunelamento por varredura, interferências de Aharonov-Bohm devido a deformações locais na rede [25]. Um detalhado estudo sobre campos de gauge em grafeno pode ser encontrado em [26], onde uma introdução em nível teórico de deformações elásticas, defeitos topológicos, e curvatura em Hamiltonianos de baixa energia para o grafeno são revisados e alguns de seus efeitos nas propriedades eletrônicas são discutidos (ver também [27] e [28]).

Nesse espírito, no capítulo 3 realizamos um estudo detalhado dos estados fermiônicos na presença de potencial vetor que acopla minimamente aos férmions juntamente com o potencial vetorial introduzido em [11]. Como uma primeira abordagem do fenômeno do fracionamento do número fermiônico em sistemas planares, na presença de vórtices magnéticos e campos magnéticos homogêneos, estudamos a possibilidade de realizar modos-zero fermiônicos analisando as diversas estruturas espinoriais que levariam ao fracionamento da carga fermiônica no caso de vórtices magnéticos com fluxo magnético finito e quantizado. Também estudamos os efeitos da adição de termos constantes que levam a gaps de energia nos estados de uma única partícula, de forma artificial, visto que a rede de grafeno não apresenta estes gaps de energia. Abordamos a questão de como esses gaps de energia introduzidos modificam as estruturas espinoriais dos estados de mínima energia (eles não possuem energia nula) quando comparadas com as estruturas espinoriais de energia nula (modos-zero) encontradas quando são considerados os efeitos de vórtices de campos magnéticos, e como estes estados de mínima energia poderiam levar à indução de número fermiônico. Neste caso são considerados campos magnéticos homogêneos, sendo que os estados de uma única partícula são todos ligados, assim não é possível apreciar a indução de número fermiônico irracional como o obtido com campos escalares em [29]. Os resultados obtidos são compatíveis com aqueles demonstrados originalmente em [30] e com os resultados obtidos no caso de campo magnético uniforme [31]. Também é feita uma análise do processo de polarização do vácuo nessa EDQ  $2 + 1$  estendida para obter a ação efetiva para os campos de gauge, no contexto relativístico, e verificar a existência de uma corrente fermiônica anômala induzida bem como a dependência desta com o potencial químico e o termo de massa que quebra paridade. Mostramos que a densidade de carga fermiônica depende dos campos eletromagnéticos conforme é mostrado em [31] e [32]. Dessa forma, estaria se realizando em nível teórico a anomalia de paridade em redes tipo colméia.

Campos magnéticos fictícios também têm sido propostos como possíveis filtros de vale no grafeno deformado [28, 33]. Em poucas palavras, o mecanismo de filtragem de vale é um processo que permite somente a transmissão de uma corrente associada a um dos vales, enquanto que filtra a outra. O resultado é a transmissão de uma corrente de vale



polarizada, o qual constitui um mecanismo fundamental na valetrônica [34], da mesma forma em que correntes de espin-polarizadas são produzidas no contexto da espintrônica. O observável quântico associado a esse mecanismo de filtragem de vale é a chamada carga (número) quiral.

A carga (número) quiral parece ter um importante significado físico e deve ser tratado como um observável físico no grafeno, sempre que a simetria de vale seja preservada em nível hamiltoniano. Nesse caso, temos cada férmion num determinado vale tem seu correspondente no vale contrário com um mesmo valor de energia (*fermion doubling*), sendo legítimo rotular os estados para uma partícula com um índice que dê conta desse fenômeno. Por essas razões, resulta mais apropriado chamar à carga quiral como *número de vale*. Por sua vez, o número de vale é definido como o número líquido de estados de vale, ou seja  $N_v = N_+ - N_-$ , onde  $N_+$  é o número total de estados (somados sob todos os estados de energia) em torno de um dos pontos de Dirac, enquanto  $N_-$  representa o número total de estados com o outro ponto de Dirac. Em algumas situações tratadas no capítulo 3, também é analisada a possibilidade de ter um número de vale induzido, incluso fracionário.

No capítulo 4, analisamos a influência de um campo magnético externo em uma amostra de grafeno com um defeito topológico local do tipo disclinação [35]. Neste caso, o resultado principal é a existência de um número de vale líquido induzido  $N_v = \pm 1/2(1 - 2\{\Phi/2\pi\})$ , onde  $0 < \{\Phi/2\pi\} < 1$  é a parte fracionária do fluxo reduzido do campo pseudomagnético. Este resultado é produto de um desbalanceamento no número de estados de um vale com respeito a outro, que por sua vez, nos permite estender mais além o conceito de filtragem de vale; poderíamos dizer que este é um caso de um vale polarizado no vácuo devido a uma filtragem parcial, quando alguns dos estados de energia zero localizados de um dos vales, são filtrados. Finalmente, é realizado um estudo analítico sobre os efeitos na densidade local de estados (Local density of states - LDOS) produzidos por uma disclinação isolada numa rede de grafeno em presença de um campo magnético uniforme. Encerramos a tese com as conclusões e comentários finais. A seguir é realizada uma abordagem sobre aspectos gerais do grafeno: formas alotrópicas, estrutura de bandas e modelo contínuo.

## Capítulo 2

# Grafeno: Um cristal bidimensional

Atualmente, as limitações dos processadores e outros componentes eletrônicos fabricados com substratos de Silício,  $Si$  -tipo-n, se tornam cada vez mais evidentes aos olhos dos desenvolvedores. Nesta última década, a necessidade de obter melhores equipamentos levou à miniaturização dos componentes, pois observaram que a redução nas dimensões dos dispositivos aumenta o seu desempenho e diminui o consumo de energia, desta forma, o custo-benefício explica a grande evolução da eletrônica no último século. Porém, reduzir as dimensões a escalas microscópicas propiciou, em consequência, a observação de fenômenos regidos predominantemente pela mecânica quântica. Por isso, esses novos materiais em escala nanométrica exibem propriedades e fenômenos físicos que não podem ser observados nos mesmos materiais em uma escala macroscópicas. Desta forma, aumentaram os esforços na busca por materiais baratos que sejam capazes de substituir o silício, surgindo como principal candidato o **grafeno**. Como dito na introdução, hoje em dia o grafeno é o material estrela na matéria condensada devido a suas múltiplas facetas. Por um lado, representa um verdadeiro cristal bidimensional, o que faz dele um material muito atrativo para a comunidade da física estatística, pois compartilha teoricamente várias propriedades estatísticas com as membranas bidimensionais [36]. E por outro, devido que a estrutura eletrônica de baixa energia do grafeno vem descrita pela equação de Dirac sem massa, abre caminho para o desenvolvimento de toda uma linha de pesquisa consistente na implementação da EQD em  $(2+1)$  dimensões num sistema da matéria condensada [5, 6]. Essa última faceta representa o espírito desta tese. Particularmente, o objetivo deste capítulo é mostrar como a dinâmica dos portadores de carga no grafeno podem ser representados por férmions de Dirac sem massa, considerando o hamiltoniano na aproximação *tight-binding* no limite de baixas energias. Mas antes disso, colocamos o grafeno em contexto, comentando brevemente sobre as distintas formas alotrópicas do carbono e como algumas dessas estruturas estão em vínculo direto com o grafeno.

## 2.1 Formas alotrópicas do carbono

Os nanomateriais, ou seja, os materiais na escala nanométrica ( $10^{-9}\text{m}$ ), podem ser obtidos a partir de diferentes elementos ou compostos químicos [37]. Dentro deste grupo, o carbono chamou atenção de forma significativa devido à grande diversidade de moléculas compostas deste elemento em condições termodinâmicas usuais na Terra. A razão desta versatilidade encontra-se na gama de ligações químicas resultantes da hibridação dos orbitais  $s$  e  $p$ . O carbono pertence ao grupo (ou família) 14 (anteriormente chamada *IVA*), tem 4 elétrons disponíveis para formar ligações covalentes e uma estrutura eletrônica  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Os elétrons do orbital  $1s$  são fortemente ligados ao núcleo por causa da forte atração coulombiana entre prótons e elétrons, sendo esses elétrons chamados de elétrons internos. Os outros 4 elétrons da segunda camada que não estão fortemente presos ao núcleo, são chamados elétrons de valência. Na fase cristalina, a diferença de energia entre os orbitais  $2s$  e  $2p$  é pequena comparada a sua energia de ligação química, o qual pode fazer com que a função de onda desses 4 elétrons facilmente se sobreponha, num processo chamado **hibridação**. Dependendo do grau de excitação de energia, o carbono apresenta três tipos distintos de hibridação conhecidos como:  $sp$ ,  $sp^2$  e  $sp^3$  (figura 2.1), os quais permitem a existência de diversas estruturas organizadas estáveis, tanto moleculares quanto cristalinas. Tais estruturas são chamadas **formas alotrópicas do carbono**.

**A grafite**, cuja descoberta remonta a cerca de 1400, é a forma alotrópica mais estável do carbono. É material opaco, condutor e de baixo valor agregado, mas com múltiplas e importantes aplicações industriais, embora seja mais conhecida por ser usada como mina do lápis. Estruturalmente, a grafite está constituído por camadas planas de átomos de carbono ligados entre si com hibridação  $sp^2$  com uma configuração interatômica trigonal plana, ou seja, cada átomo de carbono tem três vizinhos em um mesmo plano. As nuvens eletrônicas da camada de valência formam um ângulo de  $120^\circ$  entre si. As camadas da grafite estão ordenadas em forma hexagonal e paralelas um respeito a outra (figura 2.2), ligadas fracamente a partir de forças de Van der Waals, o que permite o deslocamento das camadas em forma horizontal com facilidade. Esse alto grau de anisotropia faz com as propriedades físicas na grafite variem notavelmente segundo a direção escolhida para medição. Por outro lado, **o diamante** (3000 a.C.) é a segunda forma alotrópica mais estável do carbono, porém, é um material com características físicas surpreendentes, as quais derivam da forte ligação covalente tridimensional entre seus átomos (figura 2.3). Na estrutura do diamante, cada átomo de carbono está ligado a quatro átomos vizinhos, sendo que os quatro elétrons disponíveis (em cada átomo) para fazer as ligações químicas se arranjam espacialmente de tal forma a ficarem em configurações do tipo  $sp^3$ . Esses orbitais formam uma estrutura tetraédrica com ângulos de  $109,5^\circ$  entre si, considerando cada átomo de carbono na posição central desses orbitais. O diamante, que é o mineral que

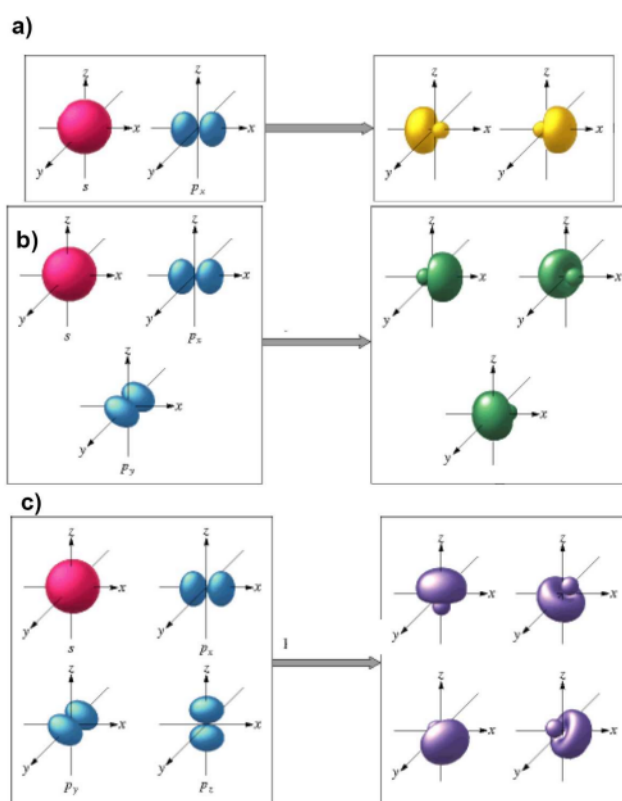


Figura 2.1: Os diferentes tipos de hibridações do carbono [27].: (a) Hibridação  $sp^1$ , (b) Hibridação  $sp^2$  e (c) Hibridação  $sp^3$

apresenta maior dureza (maior módulo de compressibilidade), é incolor e um excelente isolante elétrico em condições ambientais de temperatura e pressão. Ele é muito utilizado em aplicações industriais como ferramentas de corte. Também é comercializado em jóias, sendo o mais valioso entre os minerais.

Mais recentemente, com o desenvolvimento de novas técnicas de sintetização de materiais, novas formas alótropicas do carbono surgiram. **Os fulerenos** foram descobertos em 1985 por R. Curl, H. W. Kroto e R. E. Smalley [38]. Eles observaram estruturas constituídas de 44 a 90 átomos de carbono com hibridação  $sp^2$ . As estruturas de 60 átomos de carbono tinham a forma de uma bola de futebol com 32 faces, sendo 20 hexagonais e 12 pentagonais. Essa espécie foi chamada de *buckminsterfulereno*, em homenagem ao arquiteto Richard Buckminster Fuller, passando a ser chamada simplesmente de **fulereno** ou  $C_{60}$  (figura 2.4).

Não passou muito tempo antes de que a descoberta do  $C_{60}$  motivasse a descoberta de outras estruturas de fulerenos, principalmente materiais nanoestruturados, sendo o maior destaque **os nanotubos de carbono** [39]. Os nanotubos de carbono são estruturas formadas por átomos de carbono com ligações semelhantes às do grafite ( $sp^2$ ). Essas

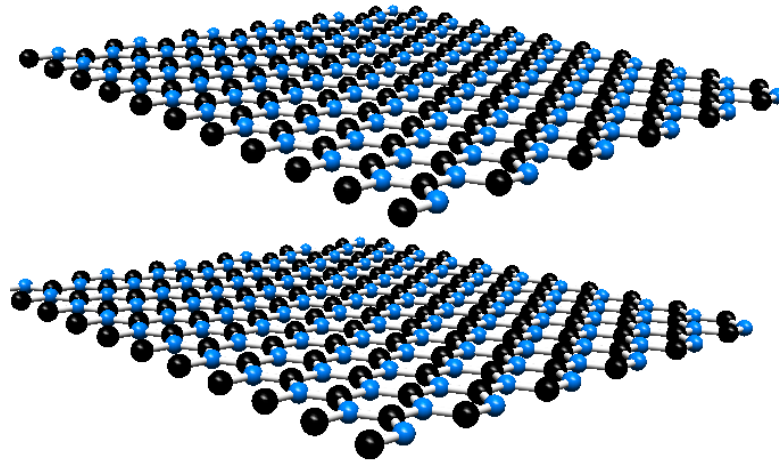


Figura 2.2: Imagem de uma bicapa de grafite.

estruturas tubulares são utilizadas como reforço em vários materiais que necessitam de dureza elevada. A diferença de dureza entre a grafite e os nanotubos de carbono deve-se ao tipo de estrutura, uma vez que tubos são mais resistentes que camadas finas.

O último material em aparecer nesta lista é o alótropo do carbono mais proeminente: o **grafeno**. O grafeno é uma monocamada de átomos de carbono dispostos numa rede hexagonal plana e de espessura de apenas um átomo, apresenta hibridação  $sp^2$ . É importante resaltar que o grafeno é a base estrutural dos alótropos mencionados acima (excetuando o diamante). Por exemplo, a inclusão de 12 pentágonos na rede de grafeno produz o fulereno. Os nanotubos de carbono é uma folha finita de grafeno enrolado em forma de cilindro. A grafite nada mais é do que inúmeras camadas de grafeno paralelas entre si.

Além disso, o grafeno exibe algumas propriedades particulares, tais como:

- Resistência à ruptura ( $42N/m$ ) [40].
- Quase transparente: absorve apenas 2,3% da intensidade de luz [41].
- Em uma camada de grafeno a condutividade elétrica é  $0.96 \times 10^6 \Omega^{-1} cm^{-1}$ , o que faz dela um excelente condutor [42].
- À temperatura ambiente, a condutividade térmica do grafeno é aproximadamente  $5000W/mK$ , ou seja, conduz o calor 10 vezes melhor do que o cobre, que é um excelente condutor térmico [43].

O processo mais simples de obtenção do grafeno consiste em "descamar" um cristal de grafite usando uma fita adesiva. Depois, esses flocos finos são transferidos para um

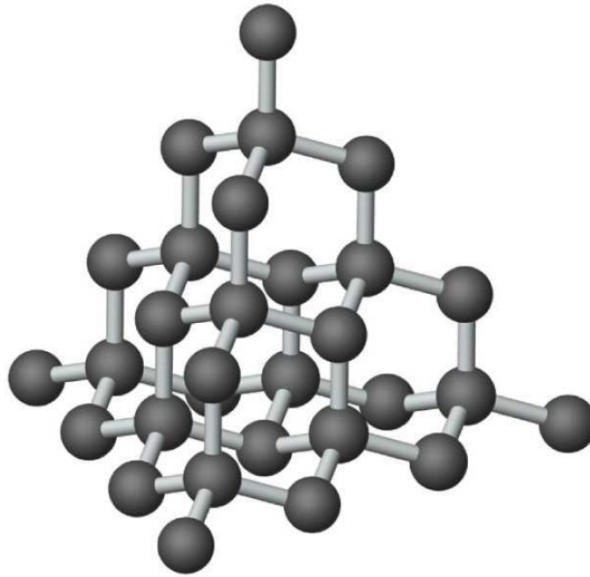


Figura 2.3: Imagem da estrutura atômica do diamante [27]..

substrato, geralmente de Si/SiO<sub>2</sub>. Com este processo obtêm-se grafenos de camada simples, dupla camada e poucas camadas com dimensões laterais na ordem de dezenas de micrômetros. Esta técnica de obtenção permitiu a Andre Geim e Konstantin Novoselov estudarem as propriedades eletrônicas do grafeno. Por esses estudos, eles foram laureados com o Prêmio Nobel de Física em 2010. Os grafenos obtidos via esta técnica são muito interessantes para estudos fundamentais de física de transporte e outras propriedades, mas não é possível usar este método para a produção de grafeno em escala industrial. A seguir, estudamos a formulação física do grafeno, partindo da aproximação *tight-binding* que descreve o salto entre primeiros vizinhos dos elétrons livres na rede, até chegar a uma teoria efetiva para férmions de Dirac no limite de baixas energias.

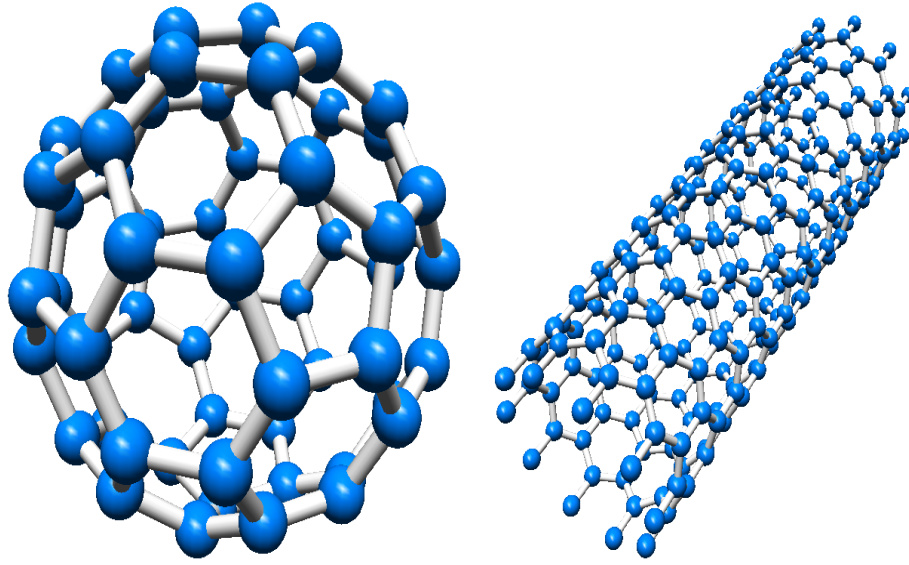


Figura 2.4: Imagem da estrutura atômica do fulereno (esquerda) e o nanotubo de carbono (direita).

## 2.2 O grafeno

Como foi dito anteriormente, o grafeno consiste de uma folha composta por átomos de carbono com hibridização  $sp^2$  de maneira que o cristal é formado por uma rede hexagonal bidimensional (figura 2.5) que pode ser visto como a superposição de duas subredes triangulares e que apresentam uma célula unitária formada por dois átomos de carbonos inequivalentes identificados por  $A$  e  $B$ . A distância entre átomos (comprimento de ligação química) de Carbono é  $a(\approx 0.142nm)$ , de maneira que os vetores-base da rede hexagonal que geram a subrede  $A$  podem ser escritos como

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

também vemos que os vetores que ligam um átomo  $A$  com seus primeiros vizinhos do tipo  $B$  são dados por

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

Os vetores da rede recíproca  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  estão relacionados com os vetores da rede real  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  pela definição  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ . Com a convenção assumida para os vetores-base

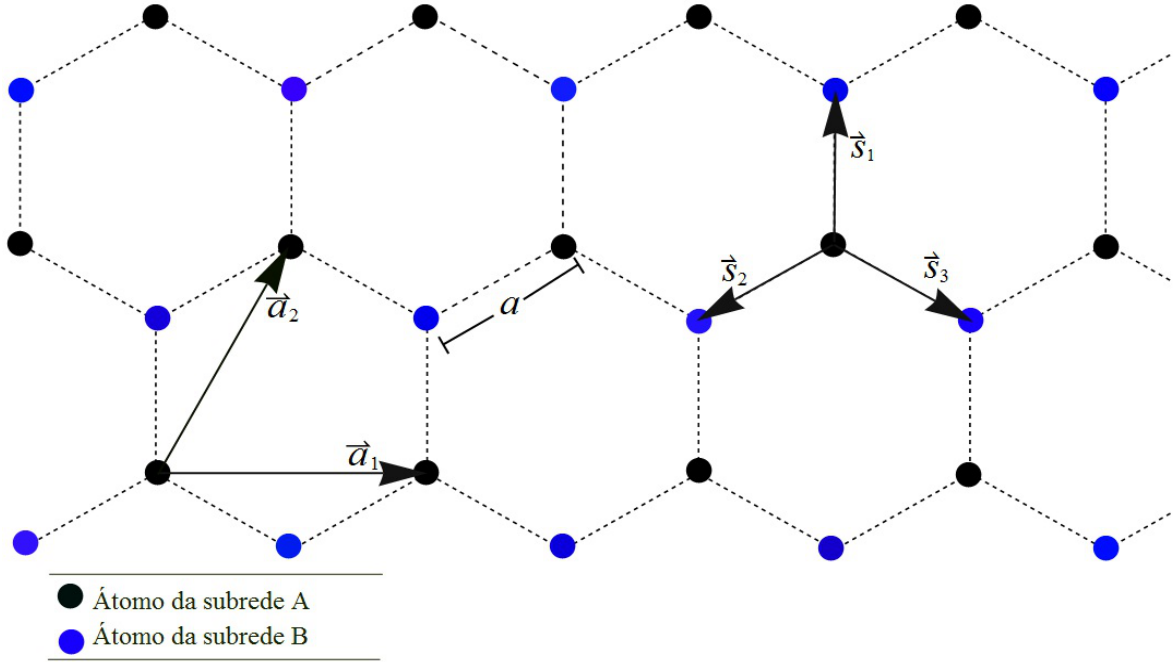


Figura 2.5: Estrutura cristalina do grafeno construído como uma superposição de duas subredes triangular  $A$  e  $B$ , com vetores-base  $\vec{a}_i$  para a rede  $A$  e vetores  $\vec{s}_i$  conectando  $A$  com  $B$ .

da rede, obtemos que os vetores da rede recíproca são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (\sqrt{3}, -1), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3a} (0, 1) \quad (2.3)$$

sendo evidente que a 1ª zona de Brillouin (ZB) pode apresentar também uma estrutura hexagonal como mostra a figura 2.6.

Cada vértice da primeira ZB contém  $1/3$  de um átomo de carbono, 3 partes de cada tipo. Portanto, o Grafeno é um cristal formado por dois átomos por célula unitária. Além disso, da configuração eletrônica do carbono e do tipo de hibridização que ele possui, vemos que por cada átomo de Carbono existem três elétrons de valência que são responsáveis da formação de fortes ligações covalentes  $\sigma$ . O quarto elétron de valência, aqueles dos orbitais  $2p_z$ ; é responsável pela formação das ligações  $\pi$ . Os elétrons que originam as ligações  $\pi$  são altamente deslocalizados. Esses elétrons comportam-se praticamente como partículas livres, sendo majoritariamente responsáveis pelas propriedades ópticas e de transporte elétrico do grafeno.

O diagrama de bandas para os elétrons  $\pi$  é composto pelas bandas de valência e de condução,  $\pi$  e  $\pi^*$ , respectivamente. Uma expressão analítica para o hamiltoniano dos elétrons  $\pi$  no formalismo de segunda quantização pode ser obtido pelo método de ligações fortes (*tight-binding*), que inclui apenas as interações entre primeiros vizinhos.

O hamiltoniano na aproximação *tight-binding*, que descreve o salto (hopping) de um



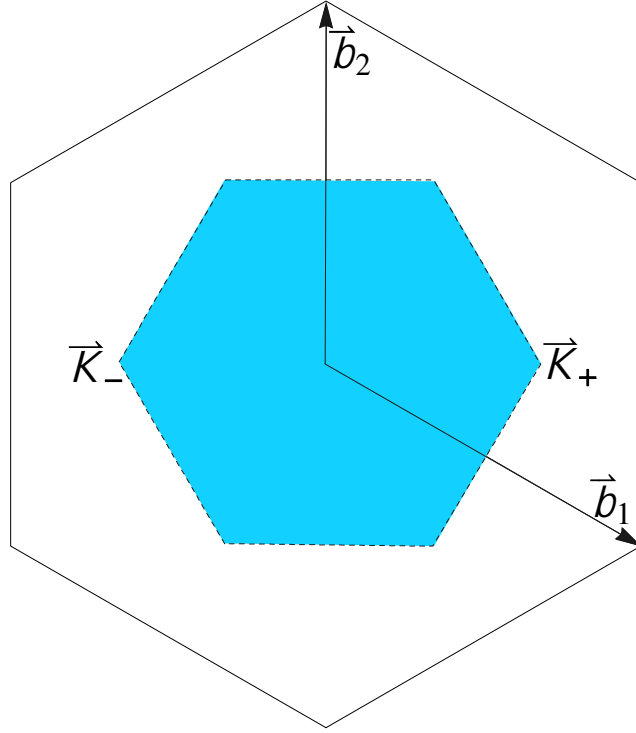


Figura 2.6: Rede recíproca do Grafeno formada pelos vetores  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$ . A região colorida representa a 1ª zona de Brillouin

elétron de um ponto da rede a outro, com uma constante de salto uniforme, é dado por

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

onde  $\Lambda_A = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$  representa os pontos de rede da subrede  $A$  e  $t$  ( $\approx 2.8$  eV) é a constante de intensidade de salto. Os operadores de aniquilação (criação)  $a$  ( $a^\dagger$ ) e  $b$  ( $b^\dagger$ ) atuam sobre  $\Lambda_A$  e  $\Lambda_B$  respectivamente e obedecem a álgebra usual onde os únicos anticomutadores não nulos são

$$\{a(\vec{r}_A), a^\dagger(\vec{r}_A)\} = 1, \quad \{b(\vec{r}_B), b^\dagger(\vec{r}_B)\} = 1. \quad (2.5)$$

Por simplicidade consideramos  $\vec{r} = \vec{r}_A$  e  $\vec{r}_B = \vec{r}_A + \vec{s}_i$ .

Desta forma, as transformadas de Fourier dos operadores de aniquilação das subredes  $A$  e  $B$  definidas como

$$\begin{Bmatrix} a(\vec{r}_A) \\ b(\vec{r}_B) \end{Bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \begin{Bmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_A} a(\vec{k}) \\ e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_B} b(\vec{k}) \end{Bmatrix} \quad (2.6)$$

transformam o hamiltoniano (2.4) em

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

onde o fator de estrutura  $\phi(\vec{k})$  é dado por

$$\phi(\vec{k}) = -t \sum_{i=1,2,3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{s}_i} = -t \left[ e^{-iak_y} + 2e^{i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right]. \quad (2.8)$$

É evidente que o hamiltoniano pode ser expresso na forma matricial

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

onde

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

e assumimos a convenção  $f(\vec{k}) = f_{\mathbf{k}}$ . As bandas de energia, representadas pelos autoestados da equação de autovalores de  $\mathcal{H}(k)$  podem ser obtidas diagonalizando este hamiltoniano, obtendo

$$E_k = \pm |\phi_{\mathbf{k}}| = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_x) + 4 \cos\left(\frac{3a}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\right)}. \quad (2.11)$$

A estrutura de bandas é mostrada na figura 2.7. Note que as bandas de valência e de condução, representadas pelas soluções  $E_k > 0$  e  $E_k < 0$ , respectivamente, se cruzam em 6 pontos para  $E = 0$ , correspondentes às esquinas da primeira ZB. Por periodicidade da rede recíproca, o número de pontos independentes (não equivalentes), posicionados no espaço recíproco são

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm = \pm \left( \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right). \quad (2.12)$$

Os pontos  $\mathbf{K}_\pm$  são conhecidos na literatura como pontos de Dirac. Como cada átomo de carbono cede um elétron do orbital  $2p$  para as bandas, a banda de valência estará totalmente cheia e a banda de condução totalmente vazia, situando-se o nível de Fermi, para o material neutro, justamente nos pontos de Dirac, e as excitações eletrônicas de baixa energia se encontrarão em torno desses pontos.

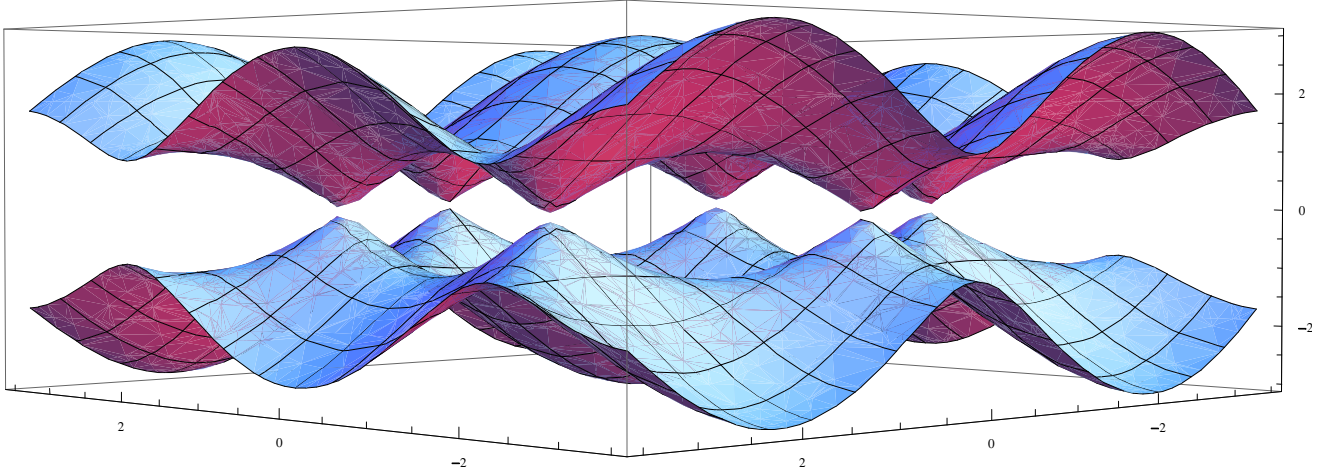


Figura 2.7: Estrutura de banda do Grafeno obtida a partir da aproximação "Tight Binding".

### 2.2.1 Modelo contínuo de baixa energia

Além disto, é possível mostrar que expandindo (2.11) na vizinhança de cada um dos pontos de Dirac e desprezando termos de ordem  $\vartheta(k_x^2, k_y^2)$  (limite de baixas energias), o espectro de energia é quase linear, tipo  $E = \pm v_f |k|$ , onde  $v_f = 3ta/2$  é a velocidade de Fermi dos elétrons perto do ponto de Dirac. Isso sugere que o elétron nesta região do espaço recíproco comporta-se como uma quase-partícula sem massa com energia positiva (negativa), no caso de ser expandido em torno de  $\mathbf{K}_+$  ( $\mathbf{K}_-$ ). Por outro lado, também é interessante analisar o que acontece com a estrutura do hamiltoniano quando expandimos  $\phi_{\mathbf{k}}$  em torno dos pontos de Dirac da forma  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{p}$ . Desta maneira, substituindo (2.2) em (2.8) e aproximando  $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}_j} \approx 1 + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}_j$ , obtemos

$$\phi_{\mathbf{p},+} \approx \frac{3ta}{2}[p_x + ip_y] \equiv +v_f p, \quad (2.13)$$

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

onde  $\phi_{\mathbf{p},\pm}$  é a linearização de  $\phi_{\mathbf{k}}$  em torno dos pontos de Dirac  $\mathbf{K}_{\pm}$ , respectivamente.

Torna se evidente a necessidade de ampliar a dimensão da estrutura matricial do hamiltoniano pelo fato de que agora existe um grau de liberdade adicional para o elétron em cada subrede, tanto na banda de condução ( $E > 0$ ) bem como na banda de valência ( $E < 0$ ). Portanto, o hamiltoniano (2.7) considerando a linearização em torno dos dois pontos de Dirac

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \Psi_p^\dagger K_0 \Psi_p = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{i=+,-} \left[ \phi_{\mathbf{p},i} a_i^\dagger(\mathbf{p}) b_i(\mathbf{p}) + \phi_{\mathbf{p},i}^* b_i^\dagger(\mathbf{p}) a_i(\mathbf{p}) \right], \quad (2.15)$$

pode ser expresso em forma matricial como

$$K_0 = v_f \begin{pmatrix} 0 & p^* & 0 & 0 \\ p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p^* \\ 0 & 0 & -p & 0 \end{pmatrix},$$

com um espinor de 4 componentes  $\Psi_{\mathbf{p}}^T = (b_{\mathbf{p},+}, a_{\mathbf{p},+}, a_{\mathbf{p},-}, b_{\mathbf{p},-})$ . É evidente, portanto, que a dinâmica dos portadores de carga no grafeno é governada pelo hamiltoniano de Dirac na representação redutível (matrizes de  $4 \times 4$ ), e esses portadores podem, então, ser comparados com partículas relativísticas. No espaço real (espaço de coordenadas), essa linearização do hamiltoniano, chamado agora de hamiltoniano de Dirac, é da forma

$$\tilde{H}_0 = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) K_0(\vec{r}) \Psi(\vec{r}), \quad (2.16)$$

onde agora

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+^b(\vec{r}) \\ \psi_+^a(\vec{r}) \\ \psi_-^a(\vec{r}) \\ \psi_-^b(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad K_0 = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & 0 & 0 \\ -2i\partial_{\bar{z}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & 0 & 2i\partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

com  $z = x + iy$  e  $\partial_z = (\partial_x - i\partial_y)/2$  e considerando  $v_f = 1$ . Em resumo, acabamos de demonstrar que, quando consideramos elétrons com baixas energias, o problema torna-se equivalente ao problema de uma quase-partícula livre sem massa obedecendo à equação de Dirac. A este modelo aproximado, damos o nome de modelo contínuo ou modelo de Dirac para o grafeno. É evidente que, devido à linearidade da relação de dispersão, o gap entre as bandas de condução e de valência é nulo. Isso é comum ocorrer em materiais constituídos por um único tipo de átomo. Podemos rescrever a equação (2.16) de forma mais compacta

$$\mathcal{H}_0 = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[ -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right] \Psi(\vec{r}), \quad (2.18)$$

onde escolhemos a representação

$$\vec{\alpha} = \beta \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix},$$

$$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

onde  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2)$  e  $\sigma_3$  são as matrizes de Pauli. A equação (2.18) resulta ser formalmente o hamiltoniano de Dirac bidimensional. Finalmente, chegamos à seguinte conclusão: os estados eletrônicos de baixa energia nas bandas  $\pi$  podem ser interpretados como estados que satisfazem a equação de Dirac sem massa, atuando a estrutura de subrede como um grau de liberdade de espin. Na literatura sobre o grafeno, é comum chamar dito grau de liberdade de **pseudoespin** ou **vale**.

## 2.3 Gaps de energia no grafeno

A ausência de gaps de energia no grafeno limita suas potenciais aplicações em dispositivos eletrônicos, de modo que implementar mecanismos de geração de gaps manipuláveis nesta rede abre passo a interessantes temas de pesquisas que estão em franco desenvolvimento. Por exemplo, comentamos que um gap de energia não nulo no sistema pode surgir devido a defeitos (distorções) na rede. Jackiw e Rebbi [16] mostraram, no poliacetileno, que essas distorções perturbam o movimento do elétron de tal forma que ela acopla aos pontos de Dirac e abre um gap no espectro de energia. Na descrição da equação de Dirac para o poliacetileno, as distorções são descritas por meio de um campo escalar que, acoplado ao férmion, proporciona uma "massa" dependente da posição para o férmion. Tais sistemas exibem um número fermiônico fracionário se a equação de Dirac possui estados ligados fermiônicos isolados no gap entre as bandas.

No contexto do grafeno, as distorções de redes (ou também chamadas de distorções de Kekulé) são incorporadas ao sistema por meio de campos escalares complexos. A interação de férmions com tais distorções de rede pode ser estudado adicionando ao hamiltoniano (2.15) o seguinte termo [10, 11]:

$$H_{Kekulé} = \Delta \sum_{\mathbf{p}} \left[ a_+^\dagger(\mathbf{p}) b_-(\mathbf{p}) + b_+^\dagger(\mathbf{p}) a_-(\mathbf{p}) \right] + \bar{\Delta} \sum_{\mathbf{p}} \left[ a_-^\dagger(\mathbf{p}) b_+(\mathbf{p}) + b_-^\dagger(\mathbf{p}) a_+(\mathbf{p}) \right], \quad (2.20)$$

onde  $\Delta$  é o parâmetro de ordem de Kekulé como função da posição. A estrutura matricial do hamiltoniano *tight binding* que inclui a distorção de Kekulé, é dado por

$$K_0 = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & \Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ -2i\partial_{\bar{z}} & 0 & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 2i\partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Este hamiltoniano linearizado que descreve a dinâmica dos elétrons sob uma rede grafeno na presença deste campo escalar complexo é convenientemente reescrito numa versão

simplificada como

$$\mathcal{H} = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[ -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + g\beta(\varphi^r - i\gamma_5\varphi^i) \right] \Psi(\vec{r}), \quad (2.22)$$

onde  $\vec{\alpha}$ ,  $\beta$  são as matrizes de Dirac na representação explicitada acima, e

$$\gamma_5 = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.$$

O hamiltoniano (2.22), pode ser obtido diretamente da expressão (2.21) identificando  $\Delta(\mathbf{r}) = g\varphi(\vec{r})$ . Portanto, a distorção de Kekulé é representada pelo campo complexo  $\varphi(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|e^{i\chi(\vec{r})} = \varphi^r(\vec{r}) + i\varphi^i(\vec{r})$ . Quando  $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0 = cte$ , a relação de dispersão adquire a forma simples  $E = \pm \sqrt{|\mathbf{p}|^2 + |\Delta_0|^2}$ , que prova que um gap no espectro da energia  $|\Delta_0|$  aparece. Mesmo se  $\Delta_0$  for complexo, o gap de energia é sempre real. Certamente, isso sugere que a fase de  $\Delta_0$  é redundante e poderia ser removida de (2.21) por meio de uma transformação quirral. Isso não acontece em sistemas onde a fase de  $\Delta(\mathbf{r})$  mude no espaço. Recentemente, Hou, Chamon e Mudry [10] mostraram que quando aquela distorção de rede exibe um perfil tipo vórtice  $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(r)e^{in\theta}$ , ela apresenta excitações de modos-zero no espectro de energia da partícula. A vorticidade da distorção, mesmo se  $n \geq 1$  ou  $n \leq -1$ , determina em qual das subredes os  $|n|$  modos-zero são suportados. A partir da existência de modos-zero fermiônicos e da simetria da subrede, eles mostraram que a carga quântica fermiônica é fracionária. Outros tipos de gaps de energia poderiam ser induzidos em redes de grafeno seguindo mecanismos similares ao apresentado em [10]. A seguir, mostramos como dois desses gaps são gerados.

### 2.3.1 Gap induzido por um potencial químico

Este tipo de gap consiste na escolha simples de um termo de massa constante, a qual foi discutida pela primeira vez por Semenoff [5]. Tal termo de massa consiste fisicamente em um potencial químico  $\mu$ , aplicado sobre as subredes  $A$  e  $B$  com a mesma intensidade, porém, com sinais opostos:

$$H_\mu = -\mu \sum_{r \in \Lambda_A} a^\dagger(\vec{r})a(\vec{r}) + \mu \sum_{r \in \Lambda_B} b^\dagger(\vec{r})b(\vec{r}) + c.c., \quad (2.23)$$

que no espaço real, na representação redutível, pode ser reduzida a

$$\tilde{H}_\mu = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) (\mu\alpha_3) \Psi(\vec{r}). \quad (2.24)$$

Este tipo de massa, que quebra paridade mantendo a simetria de reversão temporal, é naturalmente realizada em redes hexagonais onde os sítios  $A$  e  $B$  estão ocupados por átomos diferentes, tal como acontece em estruturas do tipo boro-nitreto [5].

### 2.3.2 Massa de Haldane

A massa de Haldane [6] surgiu de um modelo para o grafeno em presença de um campo magnético modulado, que respeita a simetria da rede de Bravais mas que quebra a simetria de reversão temporal. Neste contexto, Haldane mostrou que um efeito Hall quântico na ausência de um campo magnético externo poderia ser realizado se quebrarmos a simetria de reversão temporal através da inserção de fluxos locais cuja soma (por unidade de célula) é nula. Esses fluxos são implementados a nível de rede, introduzindo fatores de fase na amplitude de salto dos segundos vizinhos mais próximos. Sendo mais específicos

$$H_H = t_2 \sum_{i=1}^3 \left( \sum_{r \in \Lambda_A} a^\dagger(\vec{r}) a(\vec{r} + \vec{c}_i) e^{i\phi} + \mu \sum_{r \in \Lambda_B} b^\dagger(\vec{r}) b(\vec{r} + \vec{c}_i) e^{-i\phi} \right) + c.c., \quad (2.25)$$

onde  $\vec{c}_1 = \vec{s}_2 - \vec{s}_3$ ,  $\vec{c}_2 = \vec{s}_3 - \vec{s}_1$  e  $\vec{c}_3 = \vec{s}_1 - \vec{s}_2$ , são os vetores que conetam o seguintes vizinhos mais próximos. No limite de baixas energias, essas contribuições dão origem a

$$\tilde{H}_\mu = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) (m_\tau \alpha_3 \gamma_5) \Psi(\vec{r}), \quad (2.26)$$

onde  $m_\tau$  é o termo de massa conhecido na literatura como massa de Haldane, a qual quebra paridade e reversão temporal.

No capítulo seguinte, analisamos as influências de defeitos estruturais locais em redes de grafeno, particularmente, naqueles produzidos por disclinações e deformações elásticas, as quais fornecem campos de gauge efetivos que se acoplam aos graus de liberdade do eletrón. Isso sera mostrado a seguir.

## Capítulo 3

# Férmions de Dirac em grafeno com deformações

Em um sistema físico real, as estruturas cristalinas possuem defeitos que estão presentes mesmo estando em equilíbrio térmico, mas que são de vital importância na hora de entender as propriedades de transporte eletrônico e as propriedades mecânicas do material. O grafeno em sua forma natural é corrugado, ou seja, apresenta defeitos estruturais na rede hexagonal. O efeito destas corrugações é explicado por modelos efetivos baseados em teorias de gauge [19, 44], onde as corrugações criam um campo efetivo que mantém o material estável. Os principais modelos consideram a presença de defeitos topológicos e deformações elásticas como aproximações apropriadas para a realização física de tais corrugações na rede de grafeno. De fato, campos magnéticos fictícios em grafeno têm sido muito frutíferos tanto experimental quanto teoricamente; como por exemplo, na realização experimental dos níveis de Landau em campos pseudomagnético muito intensos (até de 300 T) devido a tensões no grafeno [24]; e na possibilidade de observar, através de um microscópio de tunelamento por varredura, interferências de Aharonov-Bohm devido a deformações locais na rede [20]. Um detalhado estudo sobre campos de gauge em grafeno pode ser encontrado em [26], onde uma introdução em nível teórico de deformações elásticas, defeitos topológicos, e curvatura em Hamiltonianos de baixa energia para o grafeno são revisados e alguns de seus efeitos nas propriedades eletrônicas são discutidos (ver também [27] e [28]). A seguir, mostramos explicitamente a forma em que campos de gauge fictícios são induzidos devido a presença de uma disclinação isolada.



### 3.1 Defeitos topológicos em grafeno: Campos de gauge induzidos por disclinações

Defeitos topológicos tais como as disclinações são usualmente usados para descrever alterações locais na rede de grafeno. Geometricamente, uma disclinação é construída pelo processo de "corte e colagem", conhecido como processo de Volterra [45]: suponha uma superfície cristalina bidimensional sobre a qual retiramos ou adicionamos uma seção angular do material, para finalmente unir as extremidades. O resultado é, uma superfície cônica quando material é retirado, ou, uma superfície hiperbólica no caso em que o material é adicionado. A figura 3.1 mostra um defeito pentagonal produzido pela substituição de um hexágono por um pentágono, que correspondem a retirar uma seção angular  $\beta = \pi/3$ . Com a introdução de curvatura na folha de grafeno produzida depois de retirar um setor angular, ocorre uma distorção geométrica na rede hexagonal, a qual pode ser mensurada pela circulação de um vetor tangencial, ao redor do ápice da estrutura que agora é cônica pentagonal, por um caminho fechado em torno do defeito. Nesta seção mostramos como o modelo contínuo do grafeno apresentado (2.18) é modificado devido à presença de tal defeito [19, 44].

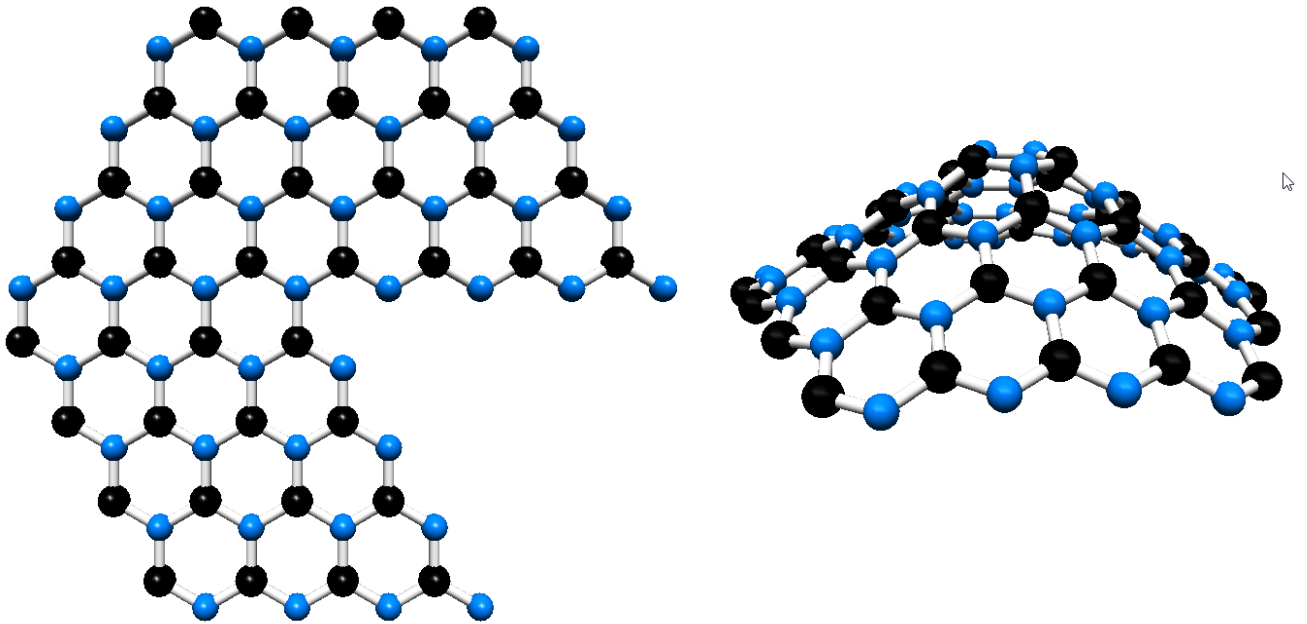


Figura 3.1: Direita: Defeito pentagonal na rede de grafeno. Esquerda: Procedimento de corte e colado na rede plana de grafeno para formar dito defeito.

Basseados na teoria de campo, o espinor definido em um plano sem defeitos topológicos ( $\beta = 0$ ) ganharia uma fase  $2\pi$  (muda de sinal) quando da uma volta completa ao redor de um caminho fechado. Na descrição bidimensional das matrizes, isto pode ser represen-

tado pela seguinte condição de contorno [46, 47]:

$$\Psi_{\beta=0}^{\pm}(r, \theta = 2\pi) = e^{\pm i 2\pi \frac{\sigma_3}{2}} \Psi_{\beta=0}^{\pm}(r, \theta = 0), \quad (3.1)$$

onde  $\Psi_{\beta=0}^{\pm}$  representa um espinor de dois componentes que estão associados ao vales  $\pm$ , de acordo com a construção (2.17). A razão da diferença de sinais na fase em (3.1) é devido às quiralidades contrárias em vale diferentes, isso como consequência de que os pontos de Dirac são opostos na rede de grafeno ( $\mathbf{K}_+ = -\mathbf{K}_-$ ). Agora, voltando ao caso que nos interessa, é claro que o percorrido angular que o elétron faz ao redor do defeito é menor que na situação plana, o que faz com que o espinor ganhe uma fase não-trivial  $\phi = 2\pi(1 - 1/6)$ , que é proporcional ao caminho angular recorrido. Esta situação faz lembrar do efeito que um campo magnético tem sobre a função de onda de um elétron movimentando-se num caminho fechado: uma circulação completa gera um fator de fase proporcional ao fluxo magnético encerrado. Este efeito é conhecido como efeito Aharonov-Bohm [48]. Desta forma, o cone pentagonal pode ser substituído por um campo magnético fictício localizado no mesmo ponto do defeito, podendo o fluxo associado a esse campo ser ajustado de tal forma que a fase adquirida pelo espinor com esse campo fictício seja a mesma daquela produzida pelo defeito. Formalmente:

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = 2\pi(1 - 1/6), \quad (3.2)$$

onde o potencial vetor mais simples que satisfaz (3.2) é um do tipo vórtice:

$$\vec{A}(x, y) = \frac{5\pi}{2} \left( -\frac{y}{x^2 + y^2}, \frac{x}{x^2 + y^2} \right) = -\frac{5\pi}{3} \vec{\nabla} \theta(r), \quad (3.3)$$

o qual em coordenadas polares se reduz ao gradiente do ângulo polar  $\theta$ . Este processo pode ser facilmente generalizado para um defeito cônico com um ângulo de disclinação arbitrário  $\beta$ . Desta forma, na representação redutível, quando o biespinor completa uma circulação ao redor do defeito, satisfaz a condição de contorno:

$$\Psi(r, \theta = 2\pi) = e^{i(\oint \vec{A} \cdot d\vec{r}) \frac{(\tau_3 \otimes \sigma_3)}{2}} \Psi(r, \theta = 0), \quad (3.4)$$

onde  $\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = 2\pi(1 - \beta)$  e as matrizes  $\tau_i$  e  $\sigma_i$  são as matrizes de Pauli atuando sobre o espaço de vale e subrede, respectivamente. Por outro lado, note que se o defeito exibe um número de lados  $N$  ímpar, como aquele mostrado na 3.1, propicia uma consequência adicional a qual foi discutida amplamente em [49],[50]: átomos pertencentes à mesma subrede (neste caso átomos da subrede  $B$ ) agora ficam conectados ao longo da linha de junção, obrigando os espinores saltarem a sítios que são da mesma subrede misturando-os, diferente do caso plano onde cada átomo de uma subrede está ligado a átomos da outra

subrede. A presença de  $\tau_3 \otimes \sigma_3$  em (3.4) dá conta da diferença de sinais na fase em (3.1) por causa das quiralidades opostas em vales diferentes, mas não descreve esse salto para subredes iguais. Isso nos diz que  $\vec{A}$  deve oferecer uma estrutura matricial de tal forma que compense o salto do espinor para átomos do mesmo sítio e que permita rodar o espinor no espaço de subrede. Resulta fascinante que esta emergência de campos de gauge efetivos seja unicamente causada por distorções geométricas da rede de grafeno e que, além disso, a natureza desses campos dependa do número de cortes feitos no material. Desta forma, a expressão (3.4) pode ser generalizada para um número  $N$  arbitrário:

$$\Psi(r, \theta = 2\pi) = e^{i(\oint \vec{A}^a T_a \cdot d\vec{r}) \frac{(\tau_3 \otimes \sigma_3)}{2}} \Psi(r, \theta = 0), \quad (3.5)$$

onde fica definido um campo de gauge não-abeliano  $\vec{A}^a T_a (\tau_3 \otimes \sigma_3) / 2$ , associado à condição de contorno (3.5), sendo  $T_a$  um conjunto de matrizes relacionadas aos graus de liberdade de subrede e de vale. Note que o produto  $T_a \cdot (\tau_3 \otimes \sigma_3)$  deve comutar com as matrizes  $\alpha^i$  da representação (2.18). Assim, concluímos que:

- Para  $N$  par, devido a não existir salto entre sítios da mesma subrede, temos que a matriz  $T_a = I \otimes \sigma_3$ , a qual não permite a rotação no espaço da subrede.
- Para  $N$  ímpar, temos que  $T_a = \tau_1 \otimes I$ , a qual dá conta da mistura entre subredes devido à presença de  $\tau_1$ .

Finalmente, podemos escrever a função de onda geral como:

$$\Psi(r, \theta) = e^{i(\oint \vec{A}_e \cdot d\vec{r}) \frac{(\tau_3 \otimes I)}{2}} e^{i(\oint \vec{A}_o \cdot d\vec{r}) \frac{(\tau_2 \otimes \sigma_3)}{2}} \Psi(r, \theta), \quad (3.6)$$

onde  $\vec{A}_e$  ( $\vec{A}_o$ ) representa o campo de gauge fictício associado ao defeito cônico com um número de lados par (ímpar). Convenientemente definimos:

$$\tau_3 \otimes I \doteq -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \equiv \gamma_5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

$$-i\tau_2 \otimes \sigma_3 \doteq \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Desta maneira, o modelo contínuo do grafeno com uma disclinação isolada gera uma densidade hamiltoniana efetiva para férmions de Dirac em duas dimensões espaciais acoplados com dois campos de gauge, na forma:

$$\mathcal{H} = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \cdot \vec{\alpha} \cdot \left[ -i \cdot \vec{\nabla} - q\gamma_5 \cdot \vec{A}_e - \eta i\gamma_3 \cdot \vec{A}_o \right] \Psi(\vec{r}), \quad (3.9)$$

onde  $(q, \eta)$  são constantes de acoplamento. Nesta tese, focamos nossa atenção única-

mente nas disclinações produzidas por defeitos cônicos de número de lados par, ou seja, considerando  $\vec{A}_o = 0$ . O campo  $\vec{A}_e$  é o mesmo usado por Jackiw e Pi [11] para estender os resultados de [10] para uma teoria mais geral, dita uma teoria de gauge quirral para o grafeno, a qual considera o seguinte hamiltoniano linearizado

$$\mathcal{H} = \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[ -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - q\gamma_5 \vec{\alpha} \cdot \vec{A}_5 + g\beta(\varphi^r - i\gamma_5\varphi^i) \right] \Psi(\vec{r}), \quad (3.10)$$

sendo a distorção de Kekulé representada pelo campo complexo  $\varphi(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|e^{i\chi(\vec{r})} = \varphi^r(\vec{r}) + i\varphi^i(\vec{r})$ , e o vetor potencial de gauge  $\vec{A}_5(\vec{r})$  permite ao hamiltoniano ser invariante sob a transformação de gauge quirral local  $\varphi \rightarrow e^{i2\omega(\vec{r})}\varphi$ ,  $\Psi \rightarrow e^{i\gamma_5\omega(\vec{r})}\Psi$  [11]. Os autores concluem que nem a estrutura espinorial do modo-zero fermiônico nem a carga fracionária são modificadas pela adição desse potencial vetorial de gauge  $\vec{A}_5$  que acopla de maneira quirral aos férmions. Nas seções seguintes analisamos a possibilidade de obter um número fermiônico induzido (sem distorções de Kekulé) quando o campo de gauge usual (potencial vetor magnético) e o campo de gauge produzido por uma disclinação isoladas, são adicionados ao sistema.

### 3.1.1 Modos-zero e fracionamento da carga fermiônica induzidos por disclinações: Vórtices pseudomagnéticos

Consideramos o hamiltoniano (3.10) excluindo a contribuição do termo de interação dos elétrons com a distorção de Kekulé e com um conveniente comportamento assintótico do vetor potencial de gauge, conseguimos mostrar a existência de modos-zero fermiônicos isolados no espectro de energia da partícula. Por simplicidade, consideramos os componentes do vetor  $\vec{A}_5(\vec{r})$  da forma

$$A_5^i = \varepsilon^{ij}\partial_j\mathcal{A}_5(r) \Rightarrow B_5 = -\vec{\nabla}^2\mathcal{A}_5(r), \quad (3.11)$$

onde  $\mathcal{A}_5(r)$  é uma função escalar que depende unicamente da coordenada radial. A equação de Dirac independente do tempo

$$\vec{\alpha} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\gamma_5\vec{A}_5)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (3.12)$$

pode ser expressa em 4 equações acopladas para os componentes do espinor. Duas dessas equações são

$$-2i[\partial_{\bar{z}} - q\partial_{\bar{z}}\mathcal{A}_5]\psi_+^b = E\psi_+^a, \quad (3.13)$$

e

$$-2i[\partial_z + q\partial_z\mathcal{A}_5]\psi_+^a = E\psi_+^b, \quad (3.14)$$

enquanto as equações para  $\psi_-^b$  e  $\psi_-^a$  podem ser obtidas tomando o complexo conjugado das equações acima e identificando  $\psi_-^b = (\psi_+^b)^*$  e  $\psi_-^a = (\psi_+^a)^*$ . Contudo, podemos demonstrar facilmente que os auto-estados de energia zero, não normalizados, podem ser dados por

$$\psi_+^b = f(z)e^{+q\mathcal{A}_5(r)}, \quad (3.15)$$

$$\psi_+^a = h(\bar{z})e^{-q\mathcal{A}_5(r)}, \quad (3.16)$$

$$\psi_-^b = \overline{f(z)}e^{+q\mathcal{A}_5(r)}, \quad (3.17)$$

$$\psi_-^a = \overline{h(\bar{z})}e^{-q\mathcal{A}_5(r)}, \quad (3.18)$$

onde  $f(z)$  e  $h(\bar{z})$  são funções holomorfas, de fato são funções inteiras. Como foi dito anteriormente, a normalização das autofunções depende do comportamento assintótico de  $\mathcal{A}_5(r)$  e, a partir da dependência funcional dos componentes do espinor, seja  $\psi_\pm^b(\vec{r})$  ou  $\psi_\pm^a(\vec{r})$  normalizáveis, obtemos as seguintes possibilidades para representar os auto-estados de energia zero

$$\Psi_0(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} e^{+il\theta} \\ 0 \\ 0 \\ e^{-il\theta} \end{pmatrix} r^l e^{q\mathcal{A}_5(r)} \quad \text{ou} \quad \Psi_0(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-il\theta} \\ e^{+il\theta} \\ 0 \end{pmatrix} r^l e^{-q\mathcal{A}_5(r)}, \quad (3.19)$$

onde  $l \in \mathbb{Z}_0^+$  e  $\theta$  é a variável angular em coordenadas cilíndricas. A degenerescência do nível de energia zero é o número de estados indicados pelo  $l$ . Além disto, ela está ligada ao fluxo magnético de acordo com os teoremas provados em [51]. Nesta seção focamos nossa atenção em sistemas que forneçam um fluxo magnético finito.

Para mostrar que uma carga fermiônica fracionária pode ser induzida com tais configurações de campo magnético, precisamos perceber uma importante simetria do operador hamiltoniano  $\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \gamma_5 \vec{A}_5)$ : ele anticomuta com a matriz  $\alpha^3$ . Essa simetria, chamada de simetria espectral, permite-nos obter as autofunções de energia negativa a partir de autofunções de energia positiva, desta maneira

$$\Psi_{-|E|}(\vec{r}) = \alpha^3 \Psi_{|E|}(\vec{r}), \quad (3.20)$$

ou seja, o espectro de energia é simétrico em torno do nível de energia zero cujas correspondentes autofunções são autoconjugadas ( $\alpha^3 \Psi_0 = \Psi_0$ ) e portanto, autofunções de  $\alpha^3$ . A existência desses modos isolados são responsáveis pelo aparecimento de números (cargas) fermiônicos (as) induzidos (as) e além disto, estas quantidades seriam proporcionais ao fluxo magnético. Esta relação entre o número fermiônico induzido e o fluxo magnético, que é verificado ocorrer só em sistemas fermiônicos bidimensionais, tem sua origem na

teoria quântica de campos no contexto de férmions relativísticos acoplados a campos de gauge onde uma corrente topologicamente não trivial é induzida no vácuo [15, 29, 30, 52].

Portanto, o mapeamento daqueles em nosso caso, levam a um número fermiônico induzido dado por

$$N = \int d^2\vec{r} \langle j^0 \rangle = \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{\Phi_5}{4\pi}, \quad (3.21)$$

onde  $\Phi_5 = \int d^2\vec{r} B_5$  é o fluxo magnético e o sinal superior (inferior) refere-se aos modos-zero que são atribuídos a férmions (antiférmions).

Portanto, a carga fermiônica induzida é finita sempre que o fluxo magnético também for finito. Seguindo o formalismo usado em [51], não é difícil mostrar que  $\mathcal{A}_5(r \rightarrow \infty) \sim \Phi_5 G(\vec{r})$ , onde  $G(\vec{r})$  é a função de Green, que no caso bidimensional adota a forma  $G(\vec{r}) = -\ln(r)/2\pi$ . Finalmente obtemos que

$$\mathcal{A}_5(r \rightarrow \infty) \sim -\frac{\Phi_5}{2\pi} \ln r. \quad (3.22)$$

Sistemas descritos por tais configurações para as funções escalares relacionados a campos magnéticos pela eq.(3.11), são conhecidos como **solenóides ou vórtices magnéticos**. Vemos que a normalizabilidade das autofunções de energia zero, as quais contêm elementos de apenas uma subrede triangular, vai depender do sinal de  $\Phi_5$ . Substituindo (3.22) em (3.19), obtemos que o modo-zero para  $\Phi_5 > 0$ , é dado por

$$\Psi_0(r \rightarrow \infty) \sim \begin{pmatrix} e^{+il\theta} \\ 0 \\ 0 \\ e^{-il\theta} \end{pmatrix} r^{l - \frac{q\Phi_5}{2\pi}}, \quad (3.23)$$

enquanto que para  $\Phi_5 < 0$ ,

$$\Psi_0(r \rightarrow \infty) \sim \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-il\theta} \\ e^{+il\theta} \\ 0 \end{pmatrix} r^{l + \frac{q\Phi_5}{2\pi}}. \quad (3.24)$$

Assumimos que  $l < \lceil \frac{\Phi_5}{2\pi} \rceil - 1$ , com  $\lceil \nu \rceil$  denotando o máximo inteiro de  $\nu$ . Se recuperarmos

$v_f$  e  $\hbar$  nas equações, o espinor dado por (3.23) torna-se

$$\Psi_0(r \rightarrow \infty) \sim \begin{pmatrix} e^{+i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} r^{l - \frac{q\Phi_5}{\hbar v_F}}, \quad (3.25)$$

implicando numa mudança similar no espinor (3.24). Devido à adimensionalidade do expoente, as unidades de fluxo magnético seriam as mesmas de  $\hbar v_F/q$ . Portanto, a carga

$$Q = q \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{n_\Phi}{2} q. \quad (3.26)$$

é fracionária se o fluxo magnético é um número inteiro ímpar ( $n_\Phi$ ) do quantum de fluxo  $\hbar v_F/q$ , onde  $h$  é a constante de Planck. A seguir, desenvolvemos uma análise semelhante considerando o vetor potencial de gauge usual  $\vec{A}$ .

### 3.1.2 Modos-zero e fracionamento da carga fermiônica induzidos por vórtices magnéticos

O hamiltoniano (3.10) é também invariante sob a transformação de gauge global usual  $\Psi \rightarrow e^{i\xi}\Psi$ , com  $\xi$  uniforme e constante. Promovendo tal transformação a uma local, um vetor potencial de gauge  $\vec{A}$  deve ser adicionado ao termo cinético de tal forma que  $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\xi$ . Neste ponto focaremos nossa atenção na estrutura espinorial dos auto-estados de energia zero do sistema quando tal vetor é levado em conta, ou seja, vamos considerar a equação de Dirac do tipo

$$\vec{\alpha} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\gamma_5\vec{A}_5 - e\vec{A})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (3.27)$$

no cenário em que ambos os potenciais de gauge gerem um fluxo magnético finito. Aqui temos explicitado as constantes de acoplamento  $e$  (unidade de carga elétrica) e  $q$ , esse último associado ao acoplamento quirial.

É interessante notar que o operador de Dirac em (3.27) anticomuta com duas matrizes:  $\alpha^3$  e  $\alpha^3\gamma_5$ . No caso anterior mostramos que as possíveis soluções de modo-zero eram autofunções de  $\alpha^3$ . Mas se considerarmos  $\vec{A}_5 = 0$  e os componentes de  $\vec{A}$  expressos como

$$A^i = \varepsilon^{ij}\partial_j\mathcal{A}(r) \Rightarrow B = -\vec{\nabla}^2\mathcal{A}(r), \quad (3.28)$$

encontramos que as soluções de energia zero são agora autofunções de  $\alpha^3\gamma_5$ . De (3.27), encontramos que os componentes do espinor satisfazem as equações

$$\begin{aligned} -2i[\partial_z + e\partial_z\mathcal{A}]\psi_+^a &= E\psi_+^b, \\ -2i[\partial_{\bar{z}} - e\partial_{\bar{z}}\mathcal{A}]\psi_+^b &= E\psi_+^a, \\ 2i[\partial_z + e\partial_z\mathcal{A}]\psi_-^b &= E\psi_-^a, \\ 2i[\partial_{\bar{z}} - e\partial_{\bar{z}}\mathcal{A}]\psi_-^a &= E\psi_-^b, \end{aligned} \quad (3.29)$$

cujas autofunções para  $E = 0$  são dadas por

$$\Psi_0(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} e^{+i\theta} \\ 0 \\ e^{+i\theta} \\ 0 \end{pmatrix} r^l e^{e\mathcal{A}(r)} \quad \text{ou} \quad \Psi_0(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-i\theta} \\ 0 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} r^l e^{-e\mathcal{A}(r)}. \quad (3.30)$$

Aqui também o espectro de energia é simétrico ao redor de  $E = 0$ , mas agora, a matriz de conjugação do espectro é representada por  $\alpha^3\gamma_5$ , ou seja, os auto-estados de energia negativa são obtidos a partir dos auto-estados de energia positiva pela operação  $\Psi_{-|E|}(\vec{r}) =$



$\alpha^3 \gamma_5 \Psi_{|E|}(\vec{r})$ .

Novamente nosso interesse principal fica em sistemas onde o fluxo magnético seja finito e portanto, forneça uma carga fermiônica induzida também finita. Sabemos, de acordo ao caso anterior, que aqueles sistemas são obtidos considerando a função escalar  $\mathcal{A}(r)$  do tipo

$$\mathcal{A}(r \rightarrow \infty) \sim -\frac{\Phi}{2\pi} \ln r . \quad (3.31)$$

Nesse caso, encontramos que as autofunções de energia zero para  $\Phi > 0$ , são dadas por

$$\Psi_0(r \rightarrow \infty) \sim \begin{pmatrix} e^{+il\theta} \\ 0 \\ e^{+il\theta} \\ 0 \end{pmatrix} r^{l - \frac{e\Phi}{2\pi}} , \quad (3.32)$$

e para  $\Phi < 0$ ,

$$\Psi_0(r \rightarrow \infty) \sim \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-il\theta} \\ 0 \\ e^{-il\theta} \end{pmatrix} r^{l + \frac{e\Phi}{2\pi}} . \quad (3.33)$$

Uma carga fermiônica induzida pode ser obtida seguindo o procedimento abordado na seção anterior, sendo evidente que a obtenção de uma carga fermiônica fracionária pode ser encontrada só no caso em que o fluxo magnético seja desta vez um número inteiro ímpar do quantum de fluxo  $h\nu_F/e$ . É interessante notar que a autofunção de energia zero para este tipo de acoplamento apresenta componentes em distintas subredes, diferente do caso em que só  $\mathcal{A}_5$  foi considerado [11]. Nesta tese nós estamos particularmente interessados no estudo da dinâmica dos férmions em redes de grafeno quando ambos os tipos de acoplamentos são incorporados.

### 3.1.3 Modos-zero e números fermiônicos induzidos por vórtices magnéticos e pseudomagnéticos

Baseados no formalismo seguido acima e considerando os casos em que ambos os fluxos magnéticos e pseudomagnéticos são quantizados, mostraremos que também é possível obter fracionamento do número fermiônico (carga) em situações em que ambos os campos estão presentes simultaneamente e em competição. Além disso, mostramos que existe outra carga, que chamaremos de carga quiral, que também pode ser fracionária. Tudo isso será mostrado a seguir.

Os componentes do espinor satisfazem as seguintes equações ( $\hbar = v_F = 1$ )

$$\begin{aligned}
-2i [\partial_z + \partial_z \mathcal{A}_+] \psi_+^a &= E \psi_+^b, \\
-2i [\partial_{\bar{z}} - \partial_{\bar{z}} \mathcal{A}_+] \psi_+^b &= E \psi_+^a, \\
2i [\partial_z + \partial_z \mathcal{A}_-] \psi_-^b &= E \psi_-^a, \\
2i [\partial_{\bar{z}} - \partial_{\bar{z}} \mathcal{A}_-] \psi_-^a &= E \psi_-^b,
\end{aligned} \tag{3.34}$$

quando ambos os vetores potenciais de gauge são levados em conta. Definimos  $\mathcal{A}_\pm = e\mathcal{A} \pm q\mathcal{A}_5$ , onde as funções escalares associadas aos dois acoplamentos apresentam os seguintes comportamentos assintóticos

$$\mathcal{A}_5(r \rightarrow \infty) \sim -\frac{n_5}{q} \ln r, \tag{3.35}$$

$$\mathcal{A}(r \rightarrow \infty) \sim -\frac{n}{e} \ln r, \tag{3.36}$$

com  $n_5$  e  $n$  como números inteiros positivos que medem a vorticidade de  $\vec{A}_5$  e de  $\vec{A}$ , respectivamente.

Auto-estados de energia zero normalizados são obtidos para alguns casos particulares, a saber

$$\Psi_{0,l_+,l_-}^{n > n_5}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi \int_0^\infty r'^{2l_++1} e^{2\mathcal{A}_+(r')} dr'}} r^{l_+} e^{il_+\theta} e^{\mathcal{A}_+(r)} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi \int_0^\infty r'^{2l_-+1} e^{2\mathcal{A}_-(r')} dr'}} r^{l_-} e^{il_-\theta} e^{\mathcal{A}_-(r)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad n > n_5, \quad l_\pm = 0, 1, \dots, [n \pm n_5 - 1], \tag{3.37}$$

ou

$$\Psi_{0,l_+,l_-}^{n < n_5}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi \int_0^\infty r'^{2l_++1} e^{2\mathcal{A}_+(r')} dr'}} r^{l_+} e^{il_+\theta} e^{\mathcal{A}_+(r)} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi \int_0^\infty r'^{2l_-+1} e^{-2\mathcal{A}_-(r')} dr'}} r^{l_-} e^{-il_-\theta} e^{-\mathcal{A}_-(r)} \end{pmatrix}, \quad n < n_5, \quad l_\pm = 0, 1, \dots, [n_5 \pm n - 1]. \quad (3.38)$$

Note que  $\alpha^3 \gamma_5 \Psi_{0,l_+,l_-}^{n > n_5}(\vec{r}) = \Psi_{0,l_+,l_-}^{n > n_5}(\vec{r})$  e  $\alpha^3 \Psi_{0,l_+,l_-}^{n < n_5}(\vec{r}) = \Psi_{0,l_+,l_-}^{n < n_5}(\vec{r})$  quando  $n_5$  e  $n$  são ambos número inteiros positivos. Quando ambos os fluxos magnéticos são negativos, os modos-zero satisfazem  $\alpha^3 \gamma_5 \Psi_{0,l_+,l_-}^{|n| > |n_5|}(\vec{r}) = -\Psi_{0,l_+,l_-}^{|n| > |n_5|}(\vec{r})$  e  $\alpha^3 \Psi_{0,l_+,l_-}^{|n| < |n_5|}(\vec{r}) = \Psi_{0,l_+,l_-}^{|n| < |n_5|}(\vec{r})$ .

Ambos os tipos de modos-zero dados pelas expressões (3.37) e (3.38) permitem o aparecimento de números fermiônicos fracionários induzidos que dependem dos fluxos magnéticos, como explicitamos abaixo.

$$N = \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{|n|}{2}, \quad \text{para } |n| > |n_5|, \quad (3.39)$$

e

$$N = \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{|n_5|}{2}, \quad \text{para } |n| < |n_5|. \quad (3.40)$$

Além disto, verificamos que o número de vale (ou quiral) definido na introdução, pode também ser induzido neste contexto. Obtemos

$$N_5 = \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \gamma_5 \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{|n_5|}{2}, \quad \text{para } |n| > |n_5|, \quad (3.41)$$

e

$$N_5 = \int d^2\vec{r} \frac{1}{2} \langle 0 | [\Psi^\dagger(\vec{r}), \gamma_5 \Psi(\vec{r})] | 0 \rangle = \mp \frac{|n|}{2}, \quad \text{para } |n| < |n_5|. \quad (3.42)$$

O número fermiônico (quiral o de vale) é proporcional à carga fermiônica (anômala) fracionária encontrada anteriormente em estruturas hexagonais de Boro-Nitreto [5].

Na seção seguinte analisamos em detalhe os estados para os elétrons em estruturas hexagonais na presença de campos magnéticos homogêneos, quando o potencial químico e o termo que quebra a paridade, definidos no capítulo anterior, são adicionados ao hamiltoniano.

## 3.2 Níveis de Landau e cargas induzidas em campos magnéticos uniformes

Nesta seção estudaremos os estados ligados para férmions quando os elétrons sofrem a ação dos potenciais vetoriais de gauge considerando campos magnéticos homogêneos. Nesta análise introduziremos na densidade Hamiltoniana aqueles termos de massa definidos no capítulo anterior, de tal forma que forneçam gaps de energia no espectro da partícula. Como foi mostrado anteriormente, tais termos são um potencial químico  $\mu\alpha^3$  e um termo de "massa" que quebra paridade  $m_\tau\alpha^3\gamma_5 = m_\tau\gamma^0\gamma^3\gamma_5 = m_\tau\beta\tau$ . O potencial químico já foi considerado em [29, 60] para mostrar a obtenção de uma carga fermiônica irracional induzida por campos escalares e ainda manter a simetria de reversão temporal. Concerne a  $m_\tau$ , consideramos ela constante, mas o mesmo termo foi considerado dependente da posição (uma parede de domínio) em [62] para estudar como as propriedades eletrônicas do grafeno são modificadas na presença desses defeitos topológicos.

É interessante notar que quando aqueles termos são adicionados simultaneamente no hamiltoniano, o correspondente operador de Dirac já não mais anticomuta com  $\alpha^3$  e  $\alpha^3\gamma_5$ . Obviamente que isto implica a perda da simetria de conjugação do espectro. Porém, ainda é possível encontrar operadores que mapeiem os auto-estados de energia negativa em positiva, e vice-versa. Um desses casos já foi estudado em [15], onde foi construído um operador (matriz) de conjugação do espectro para o caso de férmions massivos unidimensionais interagindo com um campo escalar de fundo tipo sóliton. Devido à natureza não unitária daquele operador, a densidade de estados de energia positiva mostra-se diferente da dos estados de energia negativa pertencentes ao espectro de energia do contínuo e que, como consequência disso, poderia ser induzido um número fermiônico irracional. Em nosso caso consideramos campos magnéticos homogêneos cujos níveis de energia para uma única partícula são os conhecidos níveis de Landau. Uma vez que o espectro é discreto, não há forma de se realizar um número fermiônico irracional. Aqui a densidade do número fermiônico é proporcional à degenerescência do nível de Landau mais baixo cujos auto-estados são associados a  $\alpha^3$  ou  $\alpha^3\gamma_5$ , dependendo da magnitude do campo magnético aplicado. Isto será mostrado a seguir.

Agora, a equação de Dirac é dada por

$$\left[ \vec{\alpha} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\gamma_5\vec{A}_5 - e\vec{A}) + \mu\alpha_3 + m_\tau\beta\tau \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (3.43)$$

onde os vetores potenciais são escritos como em (3.11) e (3.28) com  $\mathcal{A}(r)$  e  $\mathcal{A}_5(r)$  dados por

$$\mathcal{A}(r) = -\frac{Br^2}{4} \text{ e } \mathcal{A}_5(r) = -\frac{B_5r^2}{4} \text{ com } B, B_5 > 0. \quad (3.44)$$

Partindo de (3.34) e (3.44), o sistema de equações para os componentes do espinor pode ser escrito como

$$\begin{aligned} -i[2\partial_z - \omega_+\bar{z}] \psi_+^a &= (E - m_+) \psi_+^b, \\ -i[2\partial_{\bar{z}} + \omega_+z] \psi_+^b &= (E + m_+) \psi_+^a \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$i[2\partial_z - \omega_-\bar{z}] \psi_-^b = (E + m_-) \psi_-^a, \quad (3.46)$$

$$i[2\partial_{\bar{z}} + \omega_-z] \psi_-^a = (E - m_-) \psi_-^b, \quad (3.47)$$

onde  $\omega_{\pm} = (eB \pm qB_5)/2$  e  $m_{\pm} = \mu \pm m_{\tau}$ .

Veremos em seguida, que a estrutura espinorial dos auto-estados do operador hamiltoniano depende da condição  $\mu > m_{\tau}$  ou  $\mu < m_{\tau}$ , bem como de  $eB > qB_5$  ou  $eB < qB_5$ . Doravante consideramos  $\mu, m_{\tau} \geq 0$ . Os casos em que  $(eB, qB_5) < 0$  e/ou  $(\mu, m_{\tau}) \leq 0$  não serão considerados aqui, posto que sua análise pode ser realizada de forma similar aos casos considerados neste trabalho. Começamos distinguindo estrategicamente dois tipos de situações diferentes para os casos em que  $eB > qB_5$  e  $eB < qB_5$ .

Caso 1:  $qB_5 > eB$ . O espectro de energia é  $|E_{\pm}| = \sqrt{4n|\omega_{\pm}| + m_{\pm}^2}$  com  $n \in \mathbb{N}$ .

$$\begin{aligned} \psi_+^{E_+>0} &= \frac{e^{-i|E_+|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n,l,\omega_+}(r, \theta) \\ i\sqrt{1 - \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n-1,l+1,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi_-^{E_->0} &= \frac{e^{-i|E_-|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -i\sqrt{1 - \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n-1,l+1,|\omega_-|}^*(r, \theta) \\ \sqrt{1 + \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n,l,|\omega_-|}^*(r, \theta) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned}
\psi_+^{E_+ < 0} &= \frac{e^{i|E_+|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n,l,\omega_+}(r, \theta) \\ -i\sqrt{1 + \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n-1,l+1,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\psi_-^{E_- < 0} &= \frac{e^{i|E_-|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ i\sqrt{1 + \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n-1,l+1,|\omega_-|}^*(r, \theta) \\ \sqrt{1 - \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n,l,|\omega_-|}^*(r, \theta) \end{pmatrix} \quad (3.49)
\end{aligned}$$

onde

$$R_{n,l,\omega_\pm}(r, \theta) = \sqrt{|\omega_\pm|^{l+1} \frac{n!}{\pi(n+l)!}} e^{i\theta} r^l e^{-\frac{|\omega_\pm|}{2} r^2} L_n^l(|\omega_\pm| r^2) \text{ com } l \in \mathbb{N}, \quad (3.50)$$

são os modos de Gauss-Laguerre escritos em coordenadas cilíndricas em função dos polinômios de Laguerre associados  $L_n^l(|\omega_\pm| r^2)$ . Aqui  $R^*$  indica o complexo conjugado de  $R$ , e satisfaz

$$\int |R_{n,l,\omega_\pm}(r, \theta)|^2 r dr d\theta = 1, \quad (3.51)$$

e assumimos que  $R_{-1,l,\omega_\pm}(r, \theta) = 0$ .

Para  $n = 0$ , no caso em que  $\mu > m_\tau$  ( $m_\pm > 0$ ), a estrutura espinorial do estado fundamental adota a seguinte forma:

$$\psi_+^{E_+ = m_+} = e^{-im_+t} \begin{pmatrix} R_{0,l,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_-^{E_- = m_-} = e^{-i|m_-|t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ R_{0,l,|\omega_-|}^*(r, \theta) \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Observamos que quando  $m_\tau = 0$ , o espinor exibe a mesma estrutura obtida em (3.38), onde vórtices magnéticos foram considerados. Se devolvessemos a  $\mu$  a possibilidade de que possa assumir valores negativos, a densidade de número fermiônico induzida (pode-se entender como densidade por unidade de área), é dada por

$$\rho = \frac{1}{2} \langle 0 | [\psi^\dagger, \psi] | 0 \rangle = -\frac{qB_5}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|}, \quad (3.53)$$

$$\rho_5 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\psi^\dagger, \gamma_5 \psi] | 0 \rangle = -\frac{eB}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|}. \quad (3.54)$$

Em geral, em teorias da EDQ<sub>2</sub>, a adição no hamiltoniano de um termo que quebra a

simetria espectral faz com que a solução do estado fundamental privilegie um espectro, positivo ou negativo, sendo essa escolha dependente do sinal do termo adicionado. Em nosso caso, se  $m_\tau = 0$  para  $\mu < 0$  a autofunção correspondente a  $n = 0$  corresponderia a  $E = \mu < 0$  mas com a mesma estrutura e dependência em  $(r, \theta)$  das autofunções (3.52). Isto explica a ambiguidade do sinal encontrada para os números (cargas) fermiônicos (as) em (3.26), (3.40) e (3.42). Isto é: quando  $\mu > 0$  o modo de energia  $E = \mu > 0$  (elétron na banda de condução) contribui para  $\langle \mathbf{Q} \rangle < 0$ , e quando  $\mu < 0$  o modo de energia  $E = \mu < 0$  (elétron na banda de valência) contribui para  $\langle \mathbf{Q} \rangle > 0$ . Portanto, quando definimos o sinal de  $\mu$ , não existe ambiguidade no sinal do número fermiônico. Além disto, vemos que esses resultados são consistente com os encontrados na seção anterior, quando consideramos sistemas como vórtices magnéticos. Resultados similares considerando campos magnéticos homogêneos e inhomogêneos, podem ser encontrados em [63, 64, 65].

Caso 2:  $qB_5 < eB$ . O espectro de energia é  $|E_\pm| = \sqrt{4n|\omega_\pm| + m_\pm^2}$  com  $n \in \mathbb{N}$ .

$$\psi_+^{E_+ > 0} = \frac{e^{-i|E_+|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n,l,\omega_+}(r, \theta) \\ i\sqrt{1 - \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n-1,l+1,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

$$\psi_-^{E_- > 0} = \frac{e^{-i|E_-|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n,l,\omega_-}(r, \theta) \\ -i\sqrt{1 + \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n-1,l+1,\omega_-}(r, \theta) \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

$$\psi_+^{E_+ < 0} = \frac{e^{i|E_+|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n,l,\omega_+}(r, \theta) \\ -i\sqrt{1 + \frac{m_+}{|E_+|}} R_{n-1,l+1,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

$$\psi_-^{E_- < 0} = \frac{e^{i|E_-|t}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{1 + \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n,l,\omega_-}(r, \theta) \\ i\sqrt{1 - \frac{m_-}{|E_-|}} R_{n-1,l+1,\omega_-}(r, \theta) \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Para  $n = 0$ , no caso em que  $\mu < m_\tau$  ( $m_\pm \geq 0$ ), a estrutura espinorial do estado

fundamental adota a seguinte forma:

$$\psi_+^{E_+=m_+} = e^{-im_+t} \begin{pmatrix} R_{0,l,\omega_+}(r, \theta) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_-^{E_-=|m_-|} = e^{-i|m_-|t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R_{0,l,\omega_-}(r, \theta) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

Aqui observamos que, quando  $\mu = 0$ , o espinor exibe a mesma estrutura obtida em (3.37). Se devolvessemos a  $m_\tau$  a possibilidade de que possa assumir valores negativos, as densidades de número fermiônico induzidas é dada por

$$\rho = \frac{1}{2} \langle 0 | [\psi^\dagger, \psi] | 0 \rangle = -\frac{eB}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|}, \quad (3.60)$$

$$\rho_5 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\psi^\dagger, \gamma_5 \psi] | 0 \rangle = -\frac{qB_5}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|}, \quad (3.61)$$

resultados que são consistentes com os encontrados em (3.39) e (3.41).

Não foram consideradas os casos para  $n = 0$ , com  $\mu > m_\tau$  para o Caso 1 e  $\mu < m_\tau$  para o Caso 2, pois propiciam o surgimento de estruturas espinoriais que levam a densidades de número fermiônico não consistentes com os encontrados anteriormente. Além disso, resulta importante notar que no cálculo das densidades, não foram consideradas ambas massas simultaneamente; pois nesse caso não existiria simetria espectral nenhuma no espectro no sistema.



### 3.3 Cálculo do número fermiônico via abordagem perturbativa

Nesta seção desenvolvemos o cálculo explícito dos mesmos números fermiônicos obtidos na seção anterior, por meio do cálculo da contribuição da polarização do vácuo (ver figura 3.2)

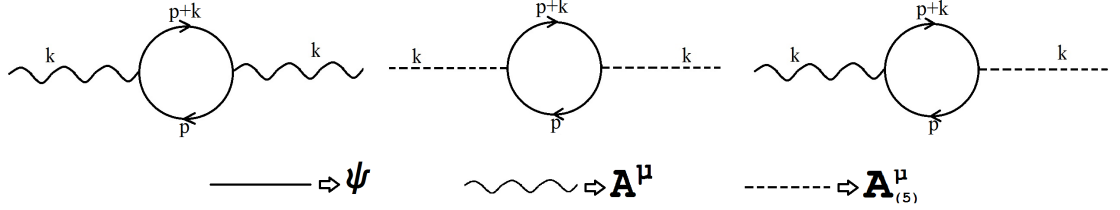


Figura 3.2: Diagramas da polarização do vácuo

e lançando mão da expansão perturbativa em  $k$  (momento externo). Neste caso, a contribuição de ordem mais baixa em  $k$  é o termo de Chern-Simons. Antecipamos aqui algumas propriedades relevantes. Primeiro é que o propagador fermiônico livre completo, para o caso que trabalhamos (representação redutível), é escrito como

$$S_F(p) = \frac{1}{\not{p} - \mu\gamma_3 - m_\tau\tau}, \quad (3.62)$$

No entanto, devido a impossibilidade de inverter a expressão (3.62) para calcular a auto-energia do fóton  $\Pi^{\mu\nu}$  dada por

$$\Pi^{\mu\nu} = -i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} Tr \left[ \frac{1}{(\not{p} + \not{k}) - \mu\gamma_3 - m_\tau\tau} \gamma^\mu (e + q\gamma^5) \frac{1}{\not{p} - \mu\gamma_3 - m_\tau\tau} \gamma^\nu (e + q\gamma^5) \right], \quad (3.63)$$

é preciso considerar dois propagadores fermiônicos separadamente, que são:

$$S_{F,\mu}(p) = \frac{1}{\not{p} - \mu\gamma_3} \quad (3.64)$$

e

$$S_{F,m_\tau}(p) = \frac{1}{\not{p} - m_\tau\tau}, \quad (3.65)$$

do um jeito similar ao feito no caso de campos magnéticos homogêneos, onde as densidades do número fermiônico encontradas via técnica não-perturbativa foram calculadas considerando  $\mu$  e  $m_\tau$  separadamente. Com o primeiro propagador verificamos que o único diagrama que terá uma contribuição de primeira ordem em  $k$  é o terceiro que aparece na figura 3.2, enquanto que se usarmos o segundo propagador, contribuição de primeira

ordem em  $k$  será encontrada somente nos dois primeiros diagramas da figura 3.2. Isto tudo é devido ao fato que a contribuição de ordem mais baixa no momento para  $\Pi^{\mu\nu}$  deve apresentar o seguinte comportamento  $\Pi^{\mu\nu} \sim \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha$ , onde para se obter o símbolo de Levi-Civita é necessário ter traço de  $\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \tau$  presente, desde que

$$\text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \tau) = -4i\varepsilon^{\mu\nu\alpha}.$$

Assim, no caso do primeiro propagador, este traço aparecerá quando combinamos  $\text{Tr}(\mu\gamma_3\gamma^\mu\not{p}\gamma^\nu\gamma_5)$ . Desta forma, encontramos que  $\Pi^{\mu\nu}$  pode se expresso como

$$\Pi^{\mu\nu} = -\frac{\mu e q}{2\pi^3} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha \int d^3 p \frac{1}{(p^2 - \mu^2)} \frac{1}{(p+k)^2 - \mu^2}. \quad (3.66)$$

Os denominadores no integrando podem ser combinados usando a fórmula de Feynman, ou seja

$$\frac{1}{(p^2 - \mu^2)} \frac{1}{(p+k)^2 - \mu^2} = \int_0^1 \frac{dz}{[p^2 - \mu^2 + 2pk(1-z) + k^2(1-z)]^2}. \quad (3.67)$$

tal que

$$\Pi^{\mu\nu} = -\frac{\mu e q}{2\pi^3} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha I(k^2), \quad (3.68)$$

onde

$$I(k^2) = \int_0^1 dz \int d^3 p \frac{1}{[p^2 - \mu^2 + k^2 z(1-z)]^2}. \quad (3.69)$$

A última integral está tabelada na maioria de livros de Teoria Quântica de Campos; recomendamos os resultados mostrados em [46] e [47]. Desta forma

$$I(k^2) = -i\pi^2 \int_0^1 \frac{dz}{[-k^2 z^2 + k^2 z - \mu^2]^{1/2}}, \quad (3.70)$$

resultando simples mostrar que

$$\lim_{k \rightarrow 0} I(k^2) = -i \frac{\pi^2}{|\mu|}. \quad (3.71)$$

Finalmente, substituindo (3.71) em (3.68), encontramos que para o primeiro propagador o termo de ordem mais baixa em  $k$  dá a seguinte contribuição

$$\Pi^{\mu\nu} = i \frac{e q}{2\pi} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha \frac{\mu}{|\mu|}. \quad (3.72)$$

Considerando que no espaço de coordenadas  $k_\alpha = i\partial_\alpha$ , construímos a ação efetiva

em segunda ordem dos campos, que neste caso é dada por

$$S_{ef}^{(2)} = \frac{1}{2} \int d^3x \left( A_\mu(x) \Pi^{\mu\nu}(\partial) A_\nu^{(5)}(x) + A_\mu^{(5)}(x) \Pi^{\mu\nu}(\partial) A_\nu(x) \right), \quad (3.73)$$

com a derivada de  $\Pi^{\mu\nu}$  atuando sobre o respectivo campo da direita. Assim, temos que ação efetiva em primeira ordem em  $k$  é da forma

$$S_{ef}^{(2,1)} = -\frac{eq}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} \int d^3x \left( A_\mu(x) \partial_\alpha A_\nu^{(5)}(x) + A_\mu^{(5)}(x) \partial_\alpha A_\nu(x) \right), \quad (3.74)$$

onde é notada a presença de termos do tipo Chern-Simons cruzados. Com essa ação efetiva, a densidade de carga fermiônica pode ser calculada da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \langle 0 | j^0 | 0 \rangle &= \frac{1}{e} \frac{\delta S_{ef}^{(2,1)}}{\delta A^0}, \\ &= -\frac{q}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|} \varepsilon^{0\nu\alpha} \partial_\alpha A_\nu^{(5)}, \\ &= -\frac{q}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|} \left( \partial_2 A_1^{(5)} - \partial_1 A_2^{(5)} \right), \\ &= -\frac{q}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|} F_{21}^{(5)}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Da mesma forma obtemos para  $\langle 0 | j_{(5)}^0 | 0 \rangle$  o seguinte

$$\langle 0 | j_{(5)}^0 | 0 \rangle = \frac{1}{q} \frac{\delta S_{ef}^{(2,1)}}{\delta A^{0(5)}} = -\frac{e}{4\pi} \frac{\mu}{|\mu|} F_{21}. \quad (3.76)$$

Os resultados acima são compatíveis com aqueles encontrados na seção anterior (expressões (3.53) e (3.54), respectivamente) para o caso em que consideramos campos magnéticos homogêneos.

Cálculos similares podem ser feitos considerando o propagador definido por (3.65). Nesse caso, termos para  $\Pi^{\mu\nu}$  do tipo  $\Pi^{\mu\nu} \sim \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha$  são obtidos quando combinamos  $Tr(m_\tau \tau \gamma^\mu \not{p} \gamma^\nu)$  ou  $Tr(m_\tau \tau \gamma^\mu \gamma_5 \not{p} \gamma^\nu \gamma_5) = m_\tau Tr(\tau \gamma^\mu \not{p} \gamma^\nu)$ . Aqui encontramos

$$\Pi^{\mu\nu} = i \frac{e^2}{2\pi} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \quad (3.77)$$

para o primeiro gráfico, e

$$\Pi^{\mu\nu} = i \frac{q^2}{2\pi} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} k_\alpha \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \quad (3.78)$$

para o segundo. A ação efetiva para cada um desses casos pode ser construída de forma

similar a (3.73). Assim, obtemos

$$\begin{aligned}
S_{ef}^{(2,1)} &= \frac{1}{2} \int d^3x (A_\mu(x) \Pi^{\mu\nu}(\partial) A_\nu(x)), \\
&= -\frac{e^2}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} \int d^3x (A_\mu(x) \partial_\alpha A_\nu(x)),
\end{aligned} \tag{3.79}$$

para o primeiro diagrama, e

$$\begin{aligned}
S_{ef}^{(2,1)} &= \frac{1}{2} \int d^3x (A_\mu^{(5)}(x) \Pi^{\mu\nu}(\partial) A_\nu^{(5)}(x)), \\
&= -\frac{q^2}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \varepsilon^{\mu\nu\alpha} \int d^3x (A_\mu^{(5)}(x) \partial_\alpha A_\nu^{(5)}(x)),
\end{aligned} \tag{3.80}$$

para o segundo. Portanto, as cargas fermiônica fornecidas por (3.79) e (3.80) são dadas por

$$\begin{aligned}
\langle 0 | j^0 | 0 \rangle &= \frac{1}{e} \frac{\delta S_{ef}^{(2,1)}}{\delta A^0}, \\
&= -\frac{e}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|} F_{21}.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle 0 | j_{(5)}^0 | 0 \rangle &= \frac{1}{q} \frac{\delta S_{ef}^{(2,1)}}{\delta A^0}, \\
&= -\frac{q}{4\pi} \frac{m_\tau}{|m_\tau|} F_{21}^{(5)}.
\end{aligned} \tag{3.82}$$

respectivamente; que mostram a compatibilidade com as expressões (3.60) e (3.61).

### 3.4 Campos de gauge induzidos por deformações elásticas

Existem outros tipos de deformações locais na rede de grafeno que podem afetar a propagação dos férmions de Dirac. Nesta seção consideramos um tipo de desordem especial, que consiste simplesmente na mudança na área da célula unitária devido a contrações ou dilatações da rede. Tal deformação implica numa variação na constante de salto entre subredes vizinhas, a qual é descrita no formalismo *tight-binding* pelo hamiltoniano.

$$H_\delta = - \sum_{r \in \Lambda_A} \sum_{i=1,2,3} \delta t_i(\vec{r}) [a^\dagger(\vec{r})b(\vec{r} + \vec{s}_i) + b^\dagger(\vec{r} + \vec{s}_i)a(\vec{r})], \quad (3.83)$$

onde  $\delta t_i$  representa a mudança na constante de intensidade de salto entre subredes diferentes. Seguindo o procedimento feito no primeiro capítulo, a equação (3.83) pode ser expressa no espaço de Fourier na forma

$$H_\delta = \sum_{\vec{k}} \left[ \mathcal{A}(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) + \mathcal{A}^*(\vec{k}) b^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}) \right], \quad (3.84)$$

onde o fator de estrutura  $\mathcal{A}(\vec{k})$  é dado por

$$\mathcal{A}(\vec{k}) = - \sum_{i=1,2,3} \delta t_i(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{s}_i}. \quad (3.85)$$

Arbitrariamente associamos a equação (3.83) com qualquer um dos dois cones de Dirac, estando o segundo cone relacionado ao primeiro via a troca  $\mathcal{A}(\vec{k}) \rightarrow \mathcal{A}^*(\vec{k})$ . Agora voltamos para espaço real. No limite de baixas energias temos que  $H_\delta$  torna-se

$$\tilde{H}_\delta^+ = \int d^2\vec{r} \left[ \mathcal{A}(\vec{r}) a_+^\dagger(\vec{r}) b_+(\vec{r}) + \mathcal{A}^*(\vec{r}) b_+^\dagger(\vec{r}) a_+(\vec{r}) \right], \quad (3.86)$$

para o ponto de Dirac  $K_+$ , e

$$\tilde{H}_\delta^+ = \int d^2\vec{r} \left[ \mathcal{A}^*(\vec{r}) a_-^\dagger(\vec{r}) b_-(\vec{r}) + \mathcal{A}(\vec{r}) b_-^\dagger(\vec{r}) a_-(\vec{r}) \right], \quad (3.87)$$

para  $K_-$ . Novamente, ambas as expressões podem ser unificadas em uma única teoria na representação redutível das matrizes gamma, obtendo

$$\begin{aligned} \tilde{H}_\delta &= \int d^2\vec{r} \Psi_+^\dagger(\vec{r}) \left[ \vec{\sigma} \cdot \vec{A}_5 \right] \Psi_+(\vec{r}) + \int d^2\vec{r} \Psi_-^\dagger(\vec{r}) \left[ \vec{\sigma} \cdot \vec{A}_5 \right] \Psi_-(\vec{r}), \\ &= \int d^2\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[ \vec{\alpha} \cdot \left( \gamma_5 \vec{A}_5 \right) \right] \Psi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (3.88)$$

onde  $\mathcal{A}(\vec{r}) = A_5^x(\vec{r}) + iA_5^y(\vec{r})$  e

$$\vec{A}_5(\vec{r}) = (A_5^x(\vec{r}), A_5^y(\vec{r})). \quad (3.89)$$

Este resultado mostra como a mudança na constante de intensidade de salto entre sub-redes devido à deformação leva também ao aparecimento de um campo vetorial fictício que acopla de forma quiral aos férmions. É importante resaltar que essa constante de salto depende intrinsecamente do comprimento de ligação do grafeno, ou seja, depende da distância entre os núcleos de dois átomos de carbono na rede que são próximos vizinhos. Nesta seção vamos considerar uma classe especial de deformação, onde a mudança na constante de intensidade de salto modifica a orientação relativa dos átomos, levando também ao surgimento de um campo de gauge, os quais atuam em cada ponto de Dirac separadamente.

Consideremos dois átomos de carbono dispostos em subredes diferentes e localizados na mesma célula unitária na posição  $\vec{r}_i \in \Lambda_A$ . A mudança no comprimento de ligação local pode ser escrito [67]

$$\delta u_i = \frac{\vec{s}_i}{a} \cdot [\vec{u}_A(\vec{r}_i) - \vec{u}_B(\vec{r}_i + \vec{s}_i)], \quad (3.90)$$

onde  $\vec{u}(\vec{r}) = (u_x, u_y)$  é o vetor deslocamento *in-plane* (dentro do plano), relacionado ao tensor deformação  $u_{ij}$  através de

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial h}{\partial x_i} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right), \quad (3.91)$$

onde  $h(\vec{r})$  representa deslocamentos *out-plane* (fora do plano). Como foi dito anteriormente, uma mudança no comprimento de ligação no átomo de carbono, leva a uma mudança na constante de intensidade de salto (2.4), explicitamente,

$$t_i \approx t_i^0 + \frac{\partial t_i}{\partial a} \delta u_i. \quad (3.92)$$

A expressão (3.92) pode ser reescrita como

$$\delta t(\vec{r}) \approx \beta \frac{\delta u(\vec{r})}{a}, \quad (3.93)$$

onde

$$\beta = \frac{\partial t}{\partial \ln(a)}. \quad (3.94)$$

Substituindo a eq. (3.90) em (3.93) e, posteriormente, substituindo o resultado em (3.85),

encontra-se que [67]

$$A_5^x(\vec{r}) = \frac{k\Phi_0}{\pi} (u_{xx} - u_{yy}), \quad (3.95)$$

$$A_5^y(\vec{r}) = -\frac{k\Phi_0}{\pi} 2u_{xy}, \quad (3.96)$$

onde  $\Phi_0 = 3\beta/2$  é o quantum de fluxo do campo pseudo-magnético. Nesta seção nós propomos um modelo de deformação alternativo ao apresentado em [66]. Em dito trabalho, os autores elaboram um experimento que permite medir o efeito que as deformações numa estrutura de grafeno provocam sobre os portadores de carga (elétrons). As deformações no material geram um campo pseudomagnético efetivo cujas componentes obedecem as relações dadas em (3.95) e (3.96). Baseados no efeito Aharonov-Bohm (que prediz que um fluxo magnético pode ser detectado através da observação de interferências quânticas dos elétrons quando se movimentam em torno de uma região onde o campo é nulo), em [66] se propõe um caminho fechado para os elétrons mediante duas impurezas e um microscópio de varredura por efeito tunel (STM) que é capaz de medir essas interferências. Ditas perturbações mudam quando no interior da região limitada pelo caminho existe uma deformação elástica. As formas *in-plane* e *out-plane* das deformações são tratadas separadamente. Para nossos objetivos, nós propomos um modelo para uma deformação local do tipo *in-plane*, o qual pode ser construído considerando primeiro  $h = 0$  e definindo as componentes do vetor de deslocamento em coordenadas polares, da seguinte forma:

$$u_r(r, \theta) = \frac{\mu_{00}}{\sigma^2} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} (r^2 + \sigma^2) \sin(3\theta), \quad (3.97)$$

$$u_\theta(r, \theta) = \frac{\mu_{00}}{\sigma^2} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} (r^2 + \sigma^2) \cos(3\theta), \quad (3.98)$$

onde  $\sigma$  é a largura da região da deformação e  $\mu_{00}$  é uma constante. Com (3.97) e (3.98) calculamos as componentes cartesianas  $u_x(r, \theta)$  e  $u_y(r, \theta)$  de  $\vec{u}(r, \theta)$ , da seguinte forma:

$$u_x(r, \theta) = u_r(r, \theta) \cos(\theta) - u_\theta(r, \theta) \sin(\theta), \quad (3.99)$$

$$u_y(r, \theta) = u_r(r, \theta) \sin(\theta) + u_\theta(r, \theta) \cos(\theta), \quad (3.100)$$

as quais serão usadas para calcular as componentes do tensor deformação  $u_{ij}$  dado em (3.91) para uma deformação *in-plane*. Nesse propósito, substituímos (3.99) e (3.100) em

(3.91), obtendo

$$u_{xx}(r, \theta) = -\frac{\mu_{00} [r^4 - r^2\sigma^2 + (r^4 + r^2\sigma^2 + 2\sigma^4) \cos(\theta)] \sin(\theta)}{r\sigma^4} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.101)$$

$$u_{yy}(r, \theta) = -\frac{\mu_{00} [2\sigma^2 (r^2 + \sigma^2) + (r^4 + r^2\sigma^2 + 2\sigma^4) \cos(\theta)] \sin(\theta)}{r\sigma^4} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.102)$$

$$u_{xy}(r, \theta) = -\frac{\mu_{00} (r^4 - 3r^2\sigma^2 - 2\sigma^4) \cos(\theta)}{2r\sigma^4} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}. \quad (3.103)$$

Finalmente, calculamos  $A_5^x(r, \theta)$  e  $A_5^y(r, \theta)$  substituindo (3.101), (3.102) e (3.103) em (3.95) e (3.96). É conveniente expressar  $\vec{A}_5(r, \theta)$  em suas componentes radial e azimutal, da seguinte forma

$$\begin{aligned} A_5^r(r, \theta) &= 0, \\ A_5^\theta(r, \theta) &= -\frac{k\Phi_0 \mu_{00} (r^4 - 3r^2\sigma^2 - 2\sigma^4)}{\pi r\sigma^4} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

Desta forma, o módulo deste campo pseudomagnético pode ser diretamente calculado como

$$B_5 = \frac{1}{r} \partial_r (r A_\theta) = -\frac{k\Phi_0 \mu_{00}}{\pi\sigma^6} (r^4 - 7r^2\sigma^2 + 4\sigma^4) e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.104)$$

cujos fluxos são dados por

$$\Phi = \int d^2\vec{r} B_5 = 4k\mu_{00}\Phi_0. \quad (3.105)$$

Se esperarmos que, inclusive em presença de um campo magnético uniforme externo, para o qual o teorema do índice não teria validade por ser aplicável unicamente para configurações de campo com fluxo finito, um número de vales dado por

$$N_v = \pm 2k\mu_{00}\Phi_0, \quad (3.106)$$

seja induzido, onde para o caso do grafeno [66] temos  $\Phi_0 = 3\beta/2 \approx 2$  é o quantum  $k\mu_{00} \approx 0.3$ . Este resultado é compatível com resultados obtidos na seção 3.3.1, quando consideramos unicamente um fluxo de campo pseudomagnético.



# Capítulo 4

## Efeitos de uma disclinação isolada em grafeno em presença de um campo magnético uniforme

Neste capítulo consideramos uma amostra simple de grafeno na presença de um campo magnético uniforme e com um defeito topológico local do tipo disclinação (ver 4.1), o qual é equivalente a considerar um campo pseudomagnético externo gerado por um solenoide infinitamente longo e fino, usualmente usado para discutir o efeito Aharonov-Bohm. A presença do campo magnético uniforme é desejável por várias razões, por exemplo, que pode ser facilmente implementado no laboratório, e também por proporcionar modos-zero fermiônicos normalizáveis e uma estrutura do tipo nível de Landau para o espectro de energia. Agora discutimos os efeitos sobre os estados de uma única partícula resolvendo a equação de Dirac de forma similar a como foi feito no caso de considerar unicamente campos uniformes.

### 4.1 Estados fermiônicos e espectro de energia

De forma similar ao capítulo anterior, escrevemos convenientemente as componentes de  $\vec{A}$  e  $\vec{A}_5$  na forma

$$A^i = \varepsilon^{ij} \partial_j \mathcal{A}(r) \Rightarrow B = -\vec{\nabla}^2 \mathcal{A}(r), \quad (4.1)$$

$$A_5^i = \varepsilon^{ij} \partial_j \mathcal{A}_5(r) \Rightarrow B_5 = -\vec{\nabla}^2 \mathcal{A}_5(r), \quad (4.2)$$

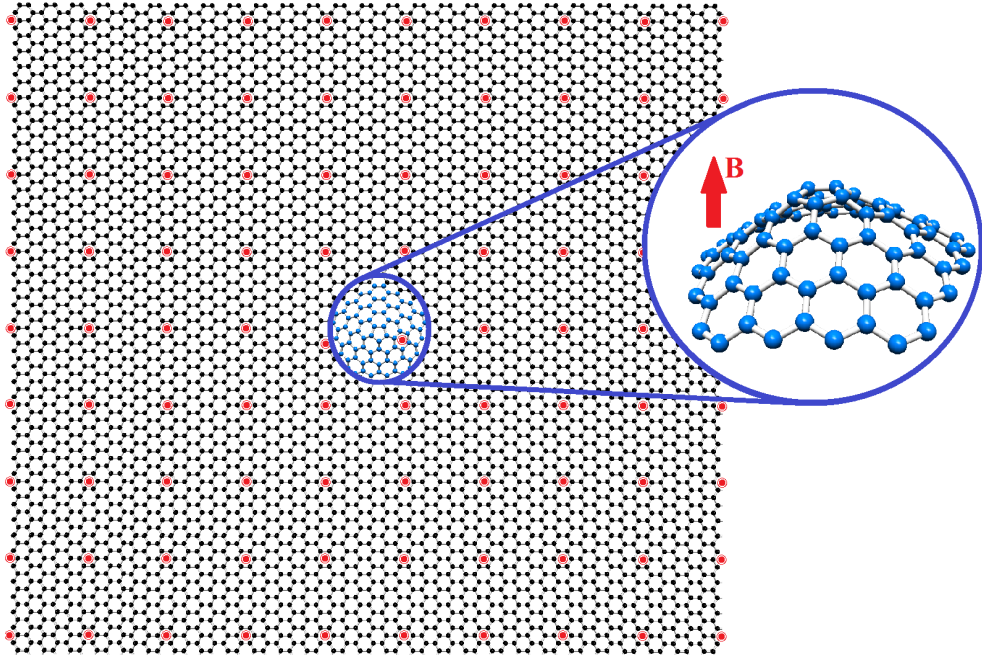


Figura 4.1: Disclinação isolada (átomos azuis) do tipo pentagonal em uma rede de grafeno na presença de um campo magnético externo (pontos vermelhos) apontando em forma perpendicular à página.

de tal forma que as componentes do espinor satisfazem as equações

$$-2i [\partial_z + \partial_z \mathcal{A}_+] \Psi_+^a = E \Psi_+^b, \quad (4.3)$$

$$-2i [\partial_{\bar{z}} - \partial_{\bar{z}} \mathcal{A}_+] \Psi_+^b = E \Psi_+^a, \quad (4.4)$$

$$2i [\partial_z + \partial_z \mathcal{A}_-] \Psi_-^b = E \Psi_-^a, \quad (4.5)$$

$$2i [\partial_{\bar{z}} - \partial_{\bar{z}} \mathcal{A}_-] \Psi_-^a = E \Psi_-^b, \quad (4.6)$$

onde usamos  $z = x + iy$  e  $\partial_z = (\partial_x - i\partial_y)/2$  e consideramos  $\mathcal{A}_\pm = e\mathcal{A} \pm \mathcal{A}_5$ . Por simplicidade escolhimos  $e > 0$  e  $q = 1$ . Como dito anteriormente, estamos interessados em um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  e um campo pseudo-magnético do tipo solenoide  $\vec{B}_5$ , ambos apontando na direção do eixo  $z$ . Desta forma,  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{A}_5$  teriam que ser dados, em coordenadas polares, por

$$\mathcal{A} = -\frac{Br^2}{4}, \quad (4.7)$$

$$\mathcal{A}_5 = -\frac{\Phi}{2\pi} \ln(r), \quad (4.8)$$

com  $(B, \Phi) > 0$ . É interessante notar que a configuração em coordenada cilíndricas escolhida para o campo  $\vec{B}_5$ , que em módulo é dado por

$$B_5 = \frac{\Phi}{2\pi r} \delta(r), \quad (4.9)$$

está diretamente ligada ao campo magnético usado no efeito Aharonov-Bohm. Sabemos que tal efeito envolve uma partícula carregada que é sensível a um campo magnético externo gerado por um solenoide infinitamente longo e infinitesimalmente fino - também chamado campo de Aharonov-Bohm (AB) - concentrado em um tubo de fluxo onde a probabilidade de encontrar a partícula é nula. Mas aqui, é o defeito topológico que é representando por tal campo (pseudo)magnético [19].

Desta forma, devido que  $B_5$  exibe a mesma natureza do campo AB, uma probabilidade nula para a partícula se encontrar dentro do tubo de fluxo pseudomagnético (associado a  $\Phi$ ), é obtida exigindo soluções regulares (que se comportem como  $r^c$  com  $c \geq 0$ , perto de  $r = 0$ ), da mesma forma que em [53, 54].

Assim, se considerarmos

$$\Psi_+^b = e^{il\theta} g_+(r) \quad \text{e} \quad \Psi_-^a = e^{ik\theta} g_-(r), \quad (4.10)$$

teríamos que as autofunções de modo-zero normalizáveis associadas com elétrons sob a influência de um campo magnético e pseudomagnético, são dados por

$$\Psi_{0,l,+} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+l-\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+l-\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} e^{+il\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} r^{l-\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2}, \quad (4.11)$$

$$\Psi_{0,k,-} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+k+\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+k+\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{+ik\theta} \\ 0 \end{pmatrix} r^{k+\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2}, \quad (4.12)$$

para  $eB > 0$ , e por

$$\Psi_{0,l,+} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+l+\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+l+\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-il\theta} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} r^{l+\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2} \quad (4.13)$$

$$\Psi_{0,k,-} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+k-\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+k-\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{-ik\theta} \end{pmatrix} r^{k-\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2}, \quad (4.14)$$

para  $eB < 0$ . Nas expressões acima  $\theta$  é a variável angular em coordenadas cilíndricas e  $(l,k) \in \mathbb{Z}$ . Das condições de normalização temos que  $l > \Phi/2\pi - 1$  e  $k > -\Phi/2\pi - 1$  para  $eB > 0$ , e  $l > -\Phi/2\pi - 1$  e  $k > \Phi/2\pi - 1$  para  $eB < 0$ . Note que existe um número de estados de modo-zero em ambos os vales e que a presença do campo pseudomagnético provoca que limite inferior de  $k$  seja menor que o limite inferior de  $l$ , no caso em que  $\Phi > 0$  e  $eB > 0$ . Isto leva a conjecturar que existem estados adicionais de  $\Psi_{0,k,-}$  com respeito a  $\Psi_{0,l,+}$ , e vice-versa quando  $\Phi < 0$ . É claro que a presença do campo magnético uniforme não unicamente proporciona estados normalizáveis, também gera um desbalance no número de estados de modo-zero.

Soluções da equação de Dirac para férmions massivos (quando um termo massa do tipo  $m\sigma^3$  é adicionado num sistema similar ao nosso) considerando unicamente um campo pseudomagnético do tipo AB foi discutido distintos trabalhos, por exemplo em [55]-[57], e para férmions sem massa em [58]. Em nosso caso, a presença do campo magnético uniforme muda o espectro da partícula do contínuo para o discreto.

Nosso tratamento para calcular os autoestados para  $E \neq 0$ , segue aquele considerado em [53] e [54]. Nesse trabalho é discutido o efeito que tem sobre as funções de onda para férmions massivos, a presença de um campo magnético uniaxial com dois contribuições, um campo magnético uniforme e um campo magnético do tipo AB. As equações diferenciais de  $2a$  ordem que aparecem em [53] e [54], são semelhantes às que surgem ao desacoplar o sistema de equações (4.3)-(4.6). Assim, substituindo (4.4) em (4.3) e (4.6) em (4.5) obtemos

$$\left\{ \zeta \frac{d^2}{d\zeta^2} + \frac{d}{d\zeta} - \frac{\zeta}{4} + \frac{1}{2} \left[ \frac{E^2}{2\gamma} + (|\nu_{\pm}| + 1) \right] - \frac{|\nu_{\pm}|^2}{4\zeta} \right\} g_{\pm} = 0, \quad (4.15)$$

com  $\zeta = \gamma r^2$ ,  $\gamma = eB/2$  e  $\nu_+ = l - \Phi/2\pi$  e  $\nu_- = k + \Phi/2\pi$ . Agora, assumindo que

$$g_{\pm}(\zeta) = \zeta^{|\nu_{\pm}|} e^{-\frac{\zeta}{4}} F_{\pm}(\zeta), \quad (4.16)$$

a expressão (4.15) pode ser simplificada em

$$\zeta \frac{d^2 F_{\pm}}{d\zeta^2} + [(|\nu_{\pm}| + 1) - \zeta] \frac{dF_{\pm}}{d\zeta} - \left[ -\frac{E^2}{4\gamma} + \frac{1}{2} (|\nu_{\pm}| - \nu_{\pm}) \right] F_{\pm} = 0 \quad (4.17)$$

onde se revela que  $F_{\pm}$  são soluções da equação hipergeométrica confluyente. As soluções para estados ligados podem ser obtidas da equação (4.17) via os polinômios de Laguerre associados  $L_n^{|\nu_{\pm}|}(\zeta)$ , com

$$n = \frac{E^2}{4\gamma} - \frac{1}{2} (|\nu_{\pm}| - \nu_{\pm}), \quad (4.18)$$

para  $n \in \mathbb{Z}$ ... Assim, as soluções para  $\Psi_+^b$  e  $\Psi_-^a$  são finalmente escritos como

$$\Psi_+^b = \mathcal{N}_+ e^{i l \theta} e^{-\frac{\gamma}{2} r^2} L_n^{|\nu_{\pm}|}(\gamma r^2), \quad (4.19)$$

$$\Psi_-^a = \mathcal{N}_- e^{i k \theta} e^{-\frac{\gamma}{2} r^2} L_n^{|\nu_{\pm}|}(\gamma r^2), \quad (4.20)$$

as quais podem ser usadas para calcular  $\Psi_+^a$  e  $\Psi_-^b$ , respectivamente. Basta substituir (4.19) em (4.3) e (4.20) em (4.5). Finalmente, considerando a normalização  $\int |\Psi_{\pm}|^2 d^2 \vec{r} = 1$ , os autoestados com energia positiva, dada por

$$|E_{\pm}| = \sqrt{2neB + \frac{1}{2} (|\nu_{\pm}| - \nu_{\pm})}, \quad (4.21)$$

podem ser expressos em forma explícita (como autofunções de  $\gamma_5$  e do momento angular) como

$$\begin{aligned} \Psi_{|E_+, l, +}(\vec{r}) &= \frac{e^{+i l \theta}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} R_{n, \nu_+}(r) \\ i R_{n-1, \nu_++1}(r) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Psi_{|E_-, k, -}(\vec{r}) &= \frac{e^{+i k \theta}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R_{n, \nu_-}(r) \\ -i R_{n-1, \nu_-+1}(r) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde definimos

$$R_{n, \nu}(r) = \sqrt{\left| \frac{eB}{2} \right|^{\nu+1} \frac{n!}{\pi \Gamma(n + \nu + 1)}} r^{\nu} e^{-\frac{|eB|}{4} r^2} L_n^{\nu}(\gamma r^2), \quad (4.23)$$

os modos de Gauss-Laguerre para este caso em coordenadas cilíndricas, convenientemente

escritos para satisfazer que

$$\int |R_{n,\nu}(r)|^2 r dr d\theta = 1, \quad (4.24)$$

e assumimos que  $R_{-1,\nu}(r) = 0$  e  $\nu_{\pm} > 1$ .

As soluções para estados ligados correspondentes a  $\nu_{\pm} < -1$  são dados por

$$\begin{aligned} \Psi_{|E_+,l,+}(\vec{r}) &= \frac{e^{+il\theta}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} R_{n,|\nu_+|}(r) \\ -iR_{n-1,|\nu_+|-1}(r) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Psi_{|E_-,k,-}(\vec{r}) &= \frac{e^{+ik\theta}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R_{n,|\nu_{\pm}|}(r) \\ -iR_{n-1,|\nu_{\pm}|+1}(r) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

enquanto que os autoestados de energia negativa para  $\nu_{\pm} > 1$  e  $\nu_{\pm} < -1$ , podem ser obtidos aplicando o operador unitário  $\alpha_3$  nos autoestados (4.22) e (4.25), respectivamente. Existem algumas sutilizas respeito aos valores que espectro energia (4.21) pode assumir. Temos que

$$|E_{\pm}| = \sqrt{2neB}, \quad (4.26)$$

com

$$n = 1, 2, 3, \dots \text{ para } \begin{cases} l \geq 2 + [\Phi/2\pi] \\ k \geq 1 - [\Phi/2\pi] \end{cases} \quad (4.27)$$

que são obtidos da condição de regularização  $\nu_{\pm} > 1$ , enquanto para  $\nu_{\pm} < -1$  obtemos

$$|E_{\pm}| = \sqrt{2eB(n - m \pm \Phi/2\pi)}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (4.28)$$

onde  $m$  representa os valores para  $l \leq -1 + [\Phi/2\pi]$  para  $|E_+|$ , e  $k \leq -2 - [\Phi/2\pi]$  para  $|E_-|$ . A expressão  $[a]$  denota a parte inteira de  $a$ .

O conjunto de autofunções (4.22) e (4.25), construídos a partir da equação diferencial de segunda ordem (4.22), são todos soluções regulares. As soluções irregulares correspondentes a  $\nu_+ = -\{\Phi/2\pi\}, 1 - \{\Phi/2\pi\}$  e  $\nu_- = \{\Phi/2\pi\}, -1 + \{\Phi/2\pi\}$  ( $0 < \{\Phi/2\pi\} < 1$  representa a parte fracional de  $\Phi/2\pi$ ) são obtidos do sistema equações diferenciais de primeira ordem (4.3)-(4.6). Encontramos que os autoestados irregulares

$$\Psi_{|E_+,1+[\frac{\Phi}{2\pi}],+} \text{ e } \Psi_{|E_-,-[\frac{\Phi}{2\pi}],-}, \quad (4.29)$$

têm seus correspondentes autovalores de energia no conjunto (4.27), enquanto para

$$\Psi_{|E_+|, [\frac{\Phi}{2\pi}], +} \text{ e } \Psi_{|E_-|, -1 - [\frac{\Phi}{2\pi}], -}, \quad (4.30)$$

seus autovalores correspondentes pertencem ao conjunto (4.28). Para os autoestados de energia zero temos  $l \geq [\Phi/2\pi]$  e  $k \geq -1 - [\Phi/2\pi]$ , dos quais é necessário jogar forar aqueles estados associados com  $l = [\Phi/2\pi]$  e  $k = -1 - [\Phi/2\pi]$ . Desta forma é garantido a existência de um conjunto completo de autoestados, o qual será a base sobre a qual o operador de campo fermiônico é construído na seguinte seção.

## 4.2 Número de vale induzido

Esta seção é focada no cálculo do número de vale induzido que é definido como o valor esperado no vácuo de operador número de vale, a saber:

$$\hat{N}_v = \frac{1}{2} \int d^2 \vec{r} \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t), \gamma_5 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right], \quad (4.31)$$

onde  $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t)$  é o operador de campo fermiônico expandido sobre a base dos autoestados de uma partícula presente na seção anterior na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = & \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \tilde{\mathbf{c}}_{0,l,+} \Psi_{0,l,+}(\vec{r}) + \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} \tilde{\mathbf{c}}_{0,k,-} \Psi_{0,k,-}(\vec{r}) + \\ & + \sum_{n=0} \left\{ \sum_l [\mathbf{c}_{n,l,+} \Psi_{|E_+|,l,+}(\vec{r}) e^{-i|E_+|t} + \right. \\ & \left. + \mathbf{d}_{n,l,+}^\dagger \alpha_3 \Psi_{|E_+|,l,+}(\vec{r}) e^{+i|E_+|t}] + \right. \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$+ \sum_k [\mathbf{c}_{n,k,-} \Psi_{|E_-|,k,-}(\vec{r}) e^{-i|E_-|t} + \quad (4.33)$$

$$\left. + \mathbf{d}_{n,k,-}^\dagger \alpha_3 \Psi_{|E_-|,k,-}(\vec{r}) e^{+i|E_-|t}] \right\}. \quad (4.34)$$

onde  $\mathbf{c}_{n,m,v}$  ( $\mathbf{d}_{n,m,v}^\dagger$ ) é o operador de absorção (criação) de uma partícula de energia  $|E_\pm|$ , momento angular  $m = l, k$  e vale  $= \pm$  na banda de condução (valência). As energias  $|E_\pm|$  na expansão acima são das pelos correspondentes conjuntos (4.27) e (4.28), os quais dependem dos valores que  $l$  e  $k$  assumem. As partículas de modo-zero são, por construção do campo fermiônico, pertencentes à banda de condução e seus operadores são representados por  $\tilde{\mathbf{c}}_{0,m,v}$ . Os operadores de criação  $\mathbf{d}_{n,m,v}^\dagger$  ( $\mathbf{c}_{n,m,v}^\dagger$ ) e absorção  $\mathbf{d}_{n,m,v}$  ( $\mathbf{c}_{n,m,v}$ ) das partículas

na banda de valência (condução) satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$\begin{aligned}
\left\{ \mathbf{c}_{n,m,v}, \mathbf{c}_{n',m',v'}^\dagger \right\} &= \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} \delta_{v,v'}, \\
\left\{ \mathbf{d}_{n,m,v}, \mathbf{d}_{n',m',v'}^\dagger \right\} &= \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} \delta_{v,v'}, \\
\left\{ \tilde{\mathbf{c}}_{0,m,v}, \tilde{\mathbf{c}}_{0,m',v'}^\dagger \right\} &= \delta_{m,m'} \delta_{v,v'},
\end{aligned} \tag{4.35}$$

mantendo qualquer outra combinação de anticomutadores iguais a zero. O operador de campo fermiônico (4.34) satisfaz a relação  $\{\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t), \hat{\Psi}(\vec{r}', t)\} = \delta^2(\vec{r} - \vec{r}')$ , desde que consideramos um conjunto completo de autoestados. Portanto, o operador de número de vale pode ser expresso como

$$\hat{N}_v = \hat{N}_+ - \hat{N}_-, \tag{4.36}$$

onde

$$\begin{aligned}
\hat{N}_+ &= \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \left( \tilde{\mathbf{c}}_{0,l,+}^\dagger \tilde{\mathbf{c}}_{0,l,+} - \frac{1}{2} \int d^2 \vec{r} |\Psi_{0,l,+}|^2 \right) \\
&+ \sum_n \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \left( \mathbf{c}_{n,l,+}^\dagger \mathbf{c}_{n,l,+} - \mathbf{d}_{n,l,+}^\dagger \mathbf{d}_{n,l,+} \right),
\end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
\hat{N}_- &= \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} \left( \tilde{\mathbf{c}}_{0,k,-}^\dagger \tilde{\mathbf{c}}_{0,k,-} - \frac{1}{2} \int d^2 \vec{r} |\Psi_{0,k,-}|^2 \right) \\
&+ \sum_n \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left( \mathbf{c}_{n,k,-}^\dagger \mathbf{c}_{n,k,-} - \mathbf{d}_{n,k,-}^\dagger \mathbf{d}_{n,k,-} \right),
\end{aligned} \tag{4.38}$$

são os operadores de número fermiônico associados aos vale + e -, respectivamente. Note que cada operador do número fermiônico adquire uma contribuição ( $C_\pm$ ) devido a presença



dos modos-zero em cada vale, assim,

$$\begin{aligned}
C_+ &= \int_0^{+\infty} d^2\vec{r} \rho_+ = -\frac{1}{2} \int d^2\vec{r} \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} |\Psi_{0,l,+}|^2 \\
&= -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\zeta e^{-\zeta} \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{e^{l-\{\Phi/2\pi\}}}{\Gamma(1+l-\Phi/2\pi)} \\
&= -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\zeta \left( 1 + \frac{e^{-\{\Phi/2\pi\}} e^{-\zeta}}{\Gamma(1-\Phi/2\pi)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Gamma(1-\{\Phi/2\pi\}, \zeta)}{\Gamma(\{\Phi/2\pi\})} \right) \\
&= -\frac{1}{2} \left( \{\Phi/2\pi\} + \int_0^{+\infty} d\zeta \right), \tag{4.39}
\end{aligned}$$

$$C_- = \int_0^{+\infty} d^2\vec{r} \rho_- = -\frac{1}{2} \int d^2\vec{r} \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} |\Psi_{0,k,-}|^2 \tag{4.40}$$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\zeta e^{-\zeta} \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} \frac{e^{k+\{\Phi/2\pi\}}}{\Gamma(1+k+\Phi/2\pi)} \tag{4.41}$$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\zeta \left( 1 + \frac{e^{\{\Phi/2\pi\}-1} e^{-\zeta}}{\Gamma(\{\Phi/2\pi\})} \right) \tag{4.42}$$

$$- \frac{\Gamma(\{\Phi/2\pi\}, \zeta)}{\Gamma(\{\Phi/2\pi\})} \Big), \tag{4.43}$$

$$= -\frac{1}{2} \left( (1 - \{\Phi/2\pi\}) + \int_0^{+\infty} d\zeta \right), \tag{4.44}$$

onde  $\Gamma(a, \zeta)$  é a função gamma incompleta superior [70], com  $\zeta = eBr^2/2$ . Os números  $C_{\pm}$  são os únicos responsáveis da existência de um valor esperado não nulo associado a cada vale, separadamente. A figura 4.2 mostra o valor absoluto de  $\rho_+(\vec{r})$  e  $\rho_-(\vec{r})$  e a diferença  $\rho(\vec{r}) = \rho_+(\vec{r}) - \rho_-(\vec{r})$ , ambas em unidades adimensionais, onde pode ser observado a forma do comportamento das densidade de número de vale entorno do defeito. Como consequência dessas contribuições, cada um dos operadores do número fermiônico  $\hat{N}_{\pm}$  exibem um valor esperado no vácuo não nulo, dados por

$$N_+ = \langle 0 | \hat{N}_+ | 0 \rangle = - \left( \frac{\Phi_B}{4\pi} + \left\{ \frac{\Phi}{4\pi} \right\} \right), \tag{4.45}$$

$$N_- = \langle 0 | \hat{N}_- | 0 \rangle = - \left( \frac{\Phi_B}{4\pi} + \frac{1}{2} - \left\{ \frac{\Phi}{4\pi} \right\} \right), \tag{4.46}$$

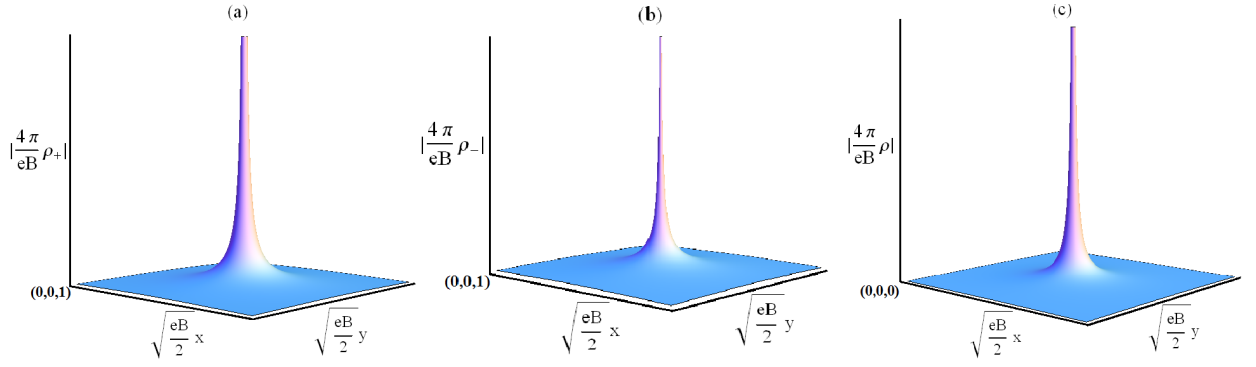


Figura 4.2: Valores absolutos de (a) densidade superficial de  $\rho_+$ ; (b) densidade superficial  $\rho_-$ ; (c) densidade superficial neta (densidade de número de vale neto)  $\rho = \rho_+ - \rho_-$  como funções da coordenada  $r$  (em unidades adimensionais).

onde  $\Phi_B/2\pi$  é o fluxo reduzido do campo magnético externo, que é considerado infinito devido que  $B$  uniforme é aplicado em princípio numa rede de grafeno de dimensões infinitas [ $r \in \{0, \infty\}$ ]. Como pode ser observado, existe uma carga fermiônica induzida associada a cada um dos vales devido a presença do campo magnético, cujos resultados são compatíveis com os resultados da carga elétrica induzida e a anomalia de paridade na QED em 2+1 dimensões. De fato, a carga total induzida do sistema (que é um observável) é

$$Q = \langle 0 | \hat{Q} | 0 \rangle = -\frac{e}{2} \left( -1 + 2e \frac{\Phi_B}{4\pi} \right). \quad (4.47)$$

Desta expressão vemos que a carga total do sistema é infinita devido que o fluxo do campo magnético externo uniforme é infinito, porém, existe também uma parte fracional  $e/2$  devido ao campo pseudomagnético do tipo AB. Por outro lado, também é induzido um número de vale, porém, finito dado por

$$\begin{aligned} N_v &= \langle 0 | \hat{N}_v | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} - \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Este último resultado é uma medida do desbalance no número de estados de modo-zero dentre dos vales, tal como foi mencionado em parágrafos anteriores. Se considerarmos que as partículas de modo-zero são pertencentes à banda de valência, obtemos o seguinte resultado para o número de vale  $N_v = -1/2(1 - 2\{\Phi/2\pi\})$ . Note que, embora  $N_v$  não dependa do campo magnético uniforme aplicado, obtemos  $N_v = 0$  em ausência do campo  $B$ , isso devido que o desbalance no número de estado de modo-zero não existiria. Por essa mesma razão, a carga total do sistema  $Q$  seria finita e igual a  $e/2$ , em concordância com os resultados obtidos no capítulo anterior.

Uma outra consequência importante dos números  $C_{\pm}$ , tal e como são apresentados em (4.39) e (4.44), é que as partículas na banda de valência ou na banda de condução carregariam uma carga de vale fracional, da seguinte forma

$$\begin{aligned}\widehat{N}_v &= |1_{\text{cond}}, n, m, \pm\rangle, \\ &= \mathbf{c}_{n,m,\pm}^\dagger |0\rangle, \\ &= \left[ \pm 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - 2 \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\} \right) \right] |1_{\text{cond}}, n, m, \pm\rangle\end{aligned}\quad (4.49)$$

$$\widehat{N}_v = |1_{\text{val}}, n, m, \pm\rangle, \quad (4.50)$$

$$= \mathbf{d}_{n,m,\pm}^\dagger |0\rangle, \quad (4.51)$$

$$= \left[ \mp 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - 2 \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\} \right) \right] |1_{\text{val}}, n, m, \pm\rangle. \quad (4.52)$$

Deste resultado podemos observar que, excetuando os estados de energia zero, a cada partícula na banda de valência no vale + (−) é atribuído a mesma carga de vale de uma partícula na banda de condução e no vale − (+). Se houbermos começado com um termo de massa do tipo Haldane ( $m_\tau \alpha_3 \gamma_5$ ), o resultado seria

$$N_v = \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \left( \frac{1}{2} - \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\} \right), \quad (4.53)$$

onde a ambiguidade no sinal é representada pelo sinal da massa. Na aproximação perturbativa tratada no capítulo anterior, quando calculamos o diagrama de polarização do vácuo usando a massa de Haldane como regulador de Pauli-Villars, o resultado obtido é diferente, lembrando

$$N_v = \frac{m_\tau}{|m_\tau|} \frac{\Phi}{2\pi}, \quad (4.54)$$

isso devido que na aproximação perturbativa é assumido *a priori* que o número de modos-zero é o mesmo em cada vale.

### 4.3 Polarização de espin induzida

Na eletrônica convencional, o processamento dos dados é feito com um linguagem binário baseado nas cargas elétricas, representadas pelos elétrons (carga negativa) e lacunas (carga positiva). Por outro lado, esses dados também podem ser gravados no espin de cada elétron individual, surgindo o campo da espintrônica. Da mesma forma em que a eletrônica se baseia na corrente elétrica, a espintrônica usa correntes para controlar o espin do elétron, fazendo-o apontar num ou noutro sentido - um efeito de magnetização, portanto. A espintrônica tem como objetivo principal o entendimento de mecanismos de manipulação

das propriedades de espin utilizando-se a carga dos elétrons e para isso, é necessário encontrar também materiais onde esses mecanismos possam ser observados. O grafeno é uma membrana de uma única camada de átomos de carbono e devido a sua estrutura, os elétrons livres dentro dele se comportam como férmions relativísticos sem massa. Esse comportamento faz com que o grafeno tenha propriedades elétricas muito particulares que fazem dele uma material promissor para aplicações na espintrônica.

Nesta seção é analisado a analogia existente entre o número de vale induzido e a polarização de espin induzida em grafeno para reforçar o desenvolvimento da valetrônica em analogia com a espintrônica. Na valetrônica os campos pseudomagnéticos devido a defeitos topológicos ou deformações elásticas existentes em amostras de grafeno, têm sido mostrados úteis no mecanismo de filtrado de vale o qual seleciona uma corrente elétrica de vale-polarizada da mesma forma em que correntes de vale de espin-polarizadas são produzidas no contexto da espintrônica. Ao longo da tese, os graus de liberdade de espin não foram considerados, desde que em amostras de grafeno perfeitas não há lugar para interações espin-espin no processo de salto entre as subredes. A seguir, desacoplamos os graus de liberdade de vale no hamiltoniano de Dirac completo que descreve a dinâmica dos elétrons a baixa energia na rede de grafeno, e acoplamos os graus de liberdade de pseudoespin (associados às subredes  $a$  e  $b$ ) com os graus de liberdade de espin. Isso nos leva a [59]

$$\hat{h} = i(\vec{\sigma} \otimes I) \cdot \left[ \vec{\nabla} - ie\vec{V} - i(I \otimes \tau_3) \vec{A} \right]. \quad (4.55)$$

A estrutura matricial 4x4 de  $\hat{h}$  vem do produto direto de matrizes 2x2; a saber, o conjunto de matrizes  $(I, \sigma^i)$  atuam sobre os graus de liberdade de pseudoespin, enquanto o conjunto formado por  $(I, \tau^a)$  atuam sobre os graus de liberdade de espin. Note que em (4.55), mudamos um pouco a notação dos campos vetoriais respeito a seções anteriores. Agora,  $\vec{V}$  é o potencial vetor associado com o campo magnético e  $\vec{A}$  é potencial vetor axial associado com o campo pseudomagnético. A fim de levar mais além a analogia entre o número de vale induzido e a polarização de espin induzida e mostrar que a polarização de espin pode ser fracional como uma consequência do desbalance no número de estados do modo-zero, vamos considerar as mesmas configurações para campos de gauge usadas na primeira seção deste capítulo.

Devido que  $\hat{h}$  comuta com o operador polarização de espin dado por  $I \otimes \tau_3$ , podemos rotular os autoestados de energia como

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_3) \otimes I \Psi, \quad (4.56)$$

onde  $\Psi_+$  e  $\Psi_-$  são autoestados de  $I \otimes \tau_3$  com autovalores  $+1$  e  $-1$ , respectivamente. Além disso,  $\hat{h}$  anticomuta com  $\mathcal{C} = \sigma_3 \otimes \tau_3$ ; portanto, se  $\Psi_{\pm}^E$  é um autoestado de  $\hat{h}$  com autovalor  $E \neq 0$ , então  $\mathcal{C}\Psi_{\pm}^E$  é um autoestados de  $\hat{h}$  com autovalor  $-E$ , e os autoestados de modo-

zero são autoconjugados. Com essas considerações podemos contruir explicitamente o conjunto completo de autoestados de  $\hat{h}$ ,  $I \otimes \tau_3$  e  $\hat{L} = -i\partial_\theta$ , da mesma forma que na primeira seção, mas, como vimos, os modos-zero são os únicos que contribuem para o cálculo de valor esperado. Então, por questões de simplicidade, somente apresentamos as soluções para  $E = 0$ , a saber

$$\Psi_{0,l,+} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+l-\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+l-\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} e^{+il\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} r^{l-\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2}, \quad (4.57)$$

$$\Psi_{0,k,-} = \sqrt{\frac{|eB/2|^{1+k+\Phi/2\pi}}{\pi\Gamma(1+k+\Phi/2\pi)}} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{+ik\theta} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} r^{k+\frac{\Phi}{2\pi}} e^{-\frac{|eB|}{4}r^2}. \quad (4.58)$$

Notamos que a única diferença com os autoestados de modo-zero mostrados em (4.11) e (4.12) está em sua estrutura matricial. A mesma coisa sucede com o restante dos autoestados. Em outras palavras,  $\Psi_{|E|,l,+}$  ( $\Psi_{|E|,k,-}$ ) apresentam a primeira e a terceira (a segunda e a quarta) componentes diferentes de zero. Os autovalores de energia são também dados por (4.27) e (4.28). Desde que o operador quântico

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \int d^2\vec{r} \left[ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t), I \otimes \tau_3 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right], \quad (4.59)$$

comuta com o hamiltoniano da teoria de campo

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{1}{2} \int d^2\vec{r} \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t), i(\vec{\sigma} \otimes I) \right. \\ \left. \cdot \left[ \vec{\nabla} - ie\vec{V} - i(I \otimes \tau_3) \vec{A} \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right\}, \end{aligned} \quad (4.60)$$

este pode ser associado com um observável físico. Portanto, seguindo o mesmo procedimento da seção anterior, podemos concluir que a polarização de espin induzida é dada por

$$\begin{aligned} S &= \langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} - \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

O qual verifica que as (quase)partículas em grafeno poderiam carregar uma polarização de espin fracional (inclusive irracional). Este resultado deve ser entendido somente como uma analogia ilustrativa ao resultado do número de vale fracional induzido por defeitos

topológicos na rede de grafeno, porque esses tipos de defeitos não afetam os graus de liberdade de polarização de spin.

## 4.4 Cálculo analítico da densidade local de estados

Na seção anterior estudamos como a simetria de vale é quebrada na presença de campos pseudomagnéticos que têm sua origem em defeitos topológicos chamados de disclinações em uma rede do tipo grafeno. Agora sabemos que o campo pseudomagnético que aparece em uma rede de grafeno, teria sua origem nas deformações estruturais da própria rede quando submetidas a tensões ou defeitos topológicos. Do ponto de vista experimental, para poder medir as possíveis influências de tais defeitos, devem existir instrumentos capazes de sensibilizar seu "olhar" na ordem dos nanos ( $10^{-9}m$ ).

Neste contexto, a microscopia de tunelamento por varredura (*Scanning Tunneling Microscopy* - STM) surge como uma técnica poderosa e muito útil para a caracterização de superfícies, sendo, hoje em dia, amplamente utilizada para obtenção de imagens e espectros. Desenvolvida por G. Benning e H. Rohrer nos laboratórios da IBM, o STM foi suficiente para render aos criadores o prêmio Nobel de Física em 1986.

O funcionamento do STM acontece da seguinte forma: Quando uma ponta metálica é aproximada de uma superfície condutora (ou semicondutora) e uma voltagem é aplicada entre ambas, surge uma corrente devido ao tunelamento de elétrons entre a ponta e a mostra. Esta corrente fornece uma medida da densidade local de estados da superfície (*Local Density of States* - LDOS) que, no caso do grafeno, pode ser separada em duas contribuições independentes associadas a cada subrede. Em [68, 69] é desenvolvido um método analítico para o cálculo da LDOS em redes de grafeno em presença de um campo magnético uniforme e um campo magnético do tipo AB. A seguir, usamos o mesmo método para calcular explicitamente a variação na LDOS produzido pelo defeito.

### 4.4.1 Método da Função de Green

A função de Green é uma ferramenta muito importante na física. Esta função é usada para o cálculo de equações diferenciais não homogêneas sujeitas a certas condições de contorno determinadas, ademais, o conceito de funções de Green aparece em muitos contextos físicos como teoria clássica, eletrostática e eletromagnetismo. Nesta seção, introduzimos o formalismo das funções de Green na forma que é usado na Mecânica Quântica e em particular na Teoria de Muitos Corpos, com o objetivo de calcular a LDOS no sistema considerado na seção anterior.

Definimos a função de Green ordenada no tempo para uma única partícula

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i \left\langle T \left[ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t) \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right] \right\rangle, \quad (4.62)$$

onde aparece o produto ordenado no tempo:

$$T \left[ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right] = \theta(t - t') \widehat{\Psi}(\vec{r}, t) \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') - \theta(t' - t) \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \widehat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (4.63)$$

Usando as eqs. (4.62) e (4.63) é possível derivar a equação de movimento para a função de Green  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ . Sabendo que

$$\frac{d}{dt} \theta(t - t') = \delta(t - t') \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \theta(t' - t) = -\delta(t - t'), \quad (4.64)$$

a derivada temporal da função de Green torna-se

$$i \frac{d}{dt} G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \left\langle \left\{ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right\} \right\rangle + \left\langle T \left[ \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\Psi}(\vec{r}, t) \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right] \right\rangle. \quad (4.65)$$

Como foi dito, um dos objetivos deste capítulo é estudar os efeitos na LDOS produzidos por uma disclinação isolada numa amostra de grafeno em presença de um campo magnético externo. Nesse espírito, consideramos o hamiltoniano  $\widehat{H}_D = \vec{\alpha} \cdot (-i\vec{\nabla} - \gamma_5 \vec{A}_5 - e\vec{A})$  do capítulo anterior:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left[ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{H}_D \right] = \widehat{H}_D \widehat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (4.66)$$

Substituímos a equação acima em (4.65), obtendo que a função de Green satisfaz

$$\gamma_0 \left[ i \frac{d}{dt} - \widehat{H}_D \right] G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (4.67)$$

ou seja, é solução de equação inhomogênea. Se o sistema está em equilíbrio, a Hamiltoniana  $\widehat{H}_D$  e não é dependente do tempo, a função de Green vai depender somente da diferença temporal  $t - t'$  e, portanto, podemos usar o espaço de Fourier para representar  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  na forma

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega G(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.68)$$

Se a forma integral da função delta de Dirac  $\delta(t - t')$

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \quad (4.69)$$

é colocada junto com (4.68) em (4.67), a equação inhomogênea (4.67) é reduzida a

$$\gamma_0 \left[ \omega - \widehat{H}_D \right] G(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.70)$$

Uma equação alternativa para (4.70) é dada por  $\gamma_0 [\omega - H_D] G(\omega) = I$ , onde a função de Green está relacionada a  $G(\omega)$  através de  $G(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \langle \vec{r} | G(\omega) | \vec{r}' \rangle$ . Note que a solução  $G(\omega) = \gamma_0 [\omega - H_D]^{-1}$  está definida para todos os valores de energia exceto para as auto-energias do Hamiltoniano  $H$ . Para superar esse inconveniente, a função de Green é definida como o limite

$$G^\pm(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\gamma_0}{\omega \pm i\eta - H_D}, \quad (4.71)$$

onde a parte imaginária  $\pm i\eta$  define duas condições de contorno necessárias para que a inversa da equação diferencial seja definida unicamente. Estas duas condições são conhecidas como a função de Green avançada  $G^a(\omega) = G^-(\omega)$  que fisicamente representa ondas que decaem no ponto de excitação e a função de Green retardada  $G^r(\omega) = G^+(\omega)$  descrevendo ondas que saem desde o ponto de excitação. No formalismo da segunda quantização, as funções de Green retardada  $G^r$  e avançada  $G^a$  são definidas como

$$G^r(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right\} \right\rangle, \quad (4.72)$$

$$G^a(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = +i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \widehat{\Psi}(\vec{r}, t), \widehat{\Psi}(\vec{r}', t') \right\} \right\rangle, \quad (4.73)$$

e relacionadas na forma  $G^r(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = [G^a(\vec{r}', t'; \vec{r}, t)]^*$ . A equação de movimento para  $G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  é calculada seguindo o mesmo procedimento utilizado para  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ , obtendo

$$\gamma_0 \left[ i \frac{d}{dt} - \widehat{H}_D \pm i0^+ \right] G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.74)$$

onde verifica-se que as funções de Green retardada  $G^r$  e avançada  $G^a$  também são soluções da equação inhomogênea separadamente. Portanto, se consideramos novamente um sistema em equilíbrio não dependente do tempo, podemos usar o espaço de Fourier para representar  $G^{r,a}$  na forma (4.68), ou seja

$$G^{r,a}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.75)$$

Uma expressão similar a (4.70) para  $G^{r,a}$  pode ser obtida substituindo (4.69) e (4.75) em (4.74) na forma

$$\gamma_0 \left[ \omega - \widehat{H}_D \pm i0^+ \right] G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.76)$$

Portanto, se o hamiltoniano  $\widehat{H}_D$  admite um conjunto de autofunções  $\{\Psi_k\}$  que é completo, então é possível construir uma função de Green a partir destas autofunções e seus



autovalores de energia. Como foi dito anteriormente, "completo" significa que o conjunto de autofunções  $\{\Psi_k\}$  satisfaz a seguinte relação de completudeza:

$$\{\Psi_k(\vec{r}, t), \bar{\Psi}_k(\vec{r}', t')\}|_{t=t'} = \gamma_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Então o seguinte se aplica:

$$G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \frac{\Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r}')}{\omega - |\varepsilon_k| \pm i0^+}, \quad (4.77)$$

onde o somatório percorre sobre todo o conjunto completo de estados do discreto e do contínuo  $\Psi_k$  com energia  $\varepsilon_k$ . Classicamente, a parte imaginária de  $G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega)$  contém informação sobre todas as órbitas fechadas que começam e terminam na posição  $\vec{r} \equiv \vec{r}'$  da fonte de elétrons. Por outro lado, quânticamente, a função de Green  $G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega)$  pode estar relacionada com a densidade local de estados  $\rho(\vec{r}; \omega)$ , definida como

$$\rho(\vec{r}; \omega) = \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r}) \delta(\omega - |\varepsilon_k|). \quad (4.78)$$

A conexão explícita entre ambas grandezas é mostrada a seguir. Usando a identidade

$$\frac{1}{x - a \pm i0^+} = P\left(\frac{1}{x - a}\right) \mp i\pi \delta(x - a), \quad (4.79)$$

onde  $P(1/x)$  é o valor principal da integral de Cauchy, podemos rescrever a equação (4.78) como

$$\rho(\vec{r}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \frac{\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r})}{\omega - |\varepsilon_k| \pm i0^+}, \quad (4.80)$$

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

$$\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r}) = \text{tr} [\gamma_0 \Psi_k(\vec{r}) \bar{\Psi}_k(\vec{r})]. \quad (4.81)$$

Finalmente, substituindo (4.81) em (4.80) temos que

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}; \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\{k\}, \text{sgn}(\varepsilon_k)} \text{tr} \left[ \gamma_0 \frac{\Psi_k^\dagger(\vec{r}) \Psi_k(\vec{r})}{\omega - |\varepsilon_k| \pm i0^+} \right], \\ \rho(\vec{r}; \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{tr} [\gamma_0 G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}; \omega)], \end{aligned} \quad (4.82)$$

o que demonstra a ligação muito estreita entre as funções de Green  $G^r(\vec{r}, \vec{r}; \omega)$  e a LDOS no espaço real. Desta forma, a partir do cálculo de funções de Green locais, podemos obter

explicitamente a densidade local de estados eletrônicos em uma dada energia  $\omega$ . A seguir, construímos a função de Green retardada  $G^r(\vec{r}, \vec{r}; \omega)$  para férmions de Dirac usando o conjunto completo de autofunções (4.22) e (4.25), seguindo o formalismo desenvolvido em [68, 69] para o cálculo analítico da LDOS. Note que a expansão em autofunções para a função de Green retardada (4.77) inclui também as soluções para energia positiva e negativa. A expressão completa para  $G^r(\vec{r}, \vec{r}; \omega)$  é colocada no Anexo A. Como foi dito anteriormente, a análise da LDOS via o STM distingue subredes, o que nos permite considerar separadamente a LDOS para as subredes  $A$  e  $B$ , de tal forma que

$$\rho(\vec{r}; \omega) = \rho_A(\vec{r}; \omega) + \rho_B(\vec{r}; \omega). \quad (4.83)$$

Para isso, é necessário identificar na função de Green aqueles elementos da matriz que representam a contribuição pura associada a cada subrede. Assim temos que a LDOS para subrede  $B$  é dada por

$$\begin{aligned} \rho_B(\vec{r}; \omega) = & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} R_{0,\nu_+}^2(r) \right. \\ & + \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\omega + i\eta) \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - |E_{n,l}|^2} R_{n,\nu_+}^2(r) \\ & + \sum_{l=[\Phi/2\pi]}^{-\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\omega + i\eta) \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - |E_{n,l}|^2} R_{n,|\nu_+|}^2(r) \\ & + \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\omega + i\eta) \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - |E_{n,k}|^2} R_{n,\nu_-}^2(r) \\ & \left. + \sum_{k=-1-[\Phi/2\pi]}^{-\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\omega + i\eta) \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - |E_{n,k}|^2} R_{n,|\nu_-|-1}^2(r) \right]. \quad (4.84) \end{aligned}$$

A primeira soma sobre  $n$  em (4.84) será calculada em detalhe. As somas dos termos restantes serão calculadas seguindo um processo semelhante, porém, o resultado final será colocado diretamente. Então, rescrevemos

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - |E_{n,l}|^2} R_{n,\nu_+}^2(r) = -\frac{eB}{2\pi} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{z + \lambda_{n,l}} \frac{n!}{\Gamma[n + \nu_+ + 1]} y^{\nu_+} e^{-y} [L_n^{\nu_+}(y)]^2, \quad (4.85)$$

onde

$$\lambda_{n,l} = |E_{n,l}|^2 = 2eB \left[ n + \frac{1}{2}(|\nu_+| - \nu_+) \right],$$

$z = -(\omega + i\eta)^2$  e  $y = \gamma r^2$ . No lado direito de (4.84), o qual chamaremos  $d_l$ , o fator

$1/(z + \lambda_{n,l})$  pode ser convenientemente escrito na forma

$$\frac{1}{z + \lambda_{n,l}} = \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta[2eBn + eB(|\nu_+| - \nu_+)]} e^{-\beta z}, \quad (4.86)$$

desta forma, (4.85) torna-se

$$d_l = -\frac{eB}{2\pi} \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta z} y^{\nu_+} e^{-y} e^{-eB(|\nu_+| - \nu_+)\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{n!}{\Gamma[n + \nu_+ + 1]} e^{-2eBn\beta} [L_n^{\nu_+}(y)]^2. \quad (4.87)$$

Usando a identidade [70]

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{m!}{\Gamma[m + \alpha + 1]} L_m^\alpha(x) L_m^\alpha(y) z^m = \frac{1}{1-z} e^{-z \frac{(x+y)}{1-z}} (xyz)^{-\alpha/2} I_\alpha \left[ 2 \frac{\sqrt{xyz}}{1-z} \right], \quad |z| < 1, \quad (4.88)$$

temos que

$$d_l = -\frac{eB}{2\pi} \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta z} e^{-eB\nu_+\beta} \frac{e^{-y \coth(eB\beta)}}{1 - e^{-2eB\beta}} I_{\nu_+} \left[ \frac{y}{\sinh(eB\beta)} \right], \quad (4.89)$$

onde  $I_\alpha(y)$  é a função de Bessel modificada de primeira espécie e ordem  $\alpha$ . As somas dos termos restantes dão resultados similares a  $d_l$ , os quais, ao serem substituídos junto com (4.89) em (4.84), proporcionam a seguinte expressão para  $\rho_B(\vec{r}; \omega)$ :

$$\begin{aligned} \rho_B(\vec{r}; \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} R_{0,\nu_+}^2(r) \right. \\ &\quad - \frac{eB}{2\pi} (\omega + i\eta) \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta z} \frac{e^{-y \coth(eB\beta)}}{1 - e^{-2eB\beta}} \times \\ &\quad \left. \left( \sum_{l=-\infty}^{+\infty} e^{eB|\nu_+|+\beta} I_{|\nu_+|} \left[ \frac{y}{\sinh(eB\beta)} \right] + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{eB|\nu_-|+\beta} I_{|\nu_-|} \left[ \frac{y}{\sinh(eB\beta)} \right] \right) \right] \end{aligned} \quad (4.90)$$

A soma sobre  $(l,k)$  em (4.90) é calculada através da identidade [70]

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-\beta(m+\eta)} I_{|p+\eta|} \left[ \frac{y}{\sinh(\beta)} \right] = e^{y \coth \beta} - \frac{\sin(\pi\eta)}{\pi} \int_0^{+\infty} d\varepsilon e^{-y \frac{\cosh \varepsilon}{\sinh \eta}} \frac{e^{-\eta(\beta+\varepsilon)}}{1 + e^{-(\beta+\varepsilon)}}, \quad (4.91)$$

obtendo finalmente

$$\begin{aligned}
\rho_B(\vec{r}; \omega) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[ \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} R_{0,\nu_+}^2(r) \right] \\
&\quad - \frac{eB}{\pi^3} \operatorname{Im} \left\{ (\omega + i\eta) \left[ g\left(y, z, \left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) - g\left(y, z, -\left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) \right] \right\} \sin\left(\pi \left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) \\
&\quad + \frac{eB}{\pi^2} \operatorname{Im} \left[ (\omega + i\eta) \int_0^{+\infty} d\beta \frac{e^{-\beta z}}{1 - e^{-2eB\beta}} \right]. \tag{4.92}
\end{aligned}$$

Um cálculo semelhante pode ser feito para obter  $\rho_A(\vec{r}; \omega)$ , assim

$$\begin{aligned}
\rho_A(\vec{r}; \omega) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[ \sum_{k=-[\Phi/2\pi]-1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} R_{0,\nu_-}^2(r) \right] \\
&\quad - \frac{eB}{\pi^3} \operatorname{Im} \left\{ (\omega + i\eta) \left[ g\left(y, z, \left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) - g\left(y, z, -\left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) \right] \right\} \sin\left(\pi \left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}\right) \\
&\quad + \frac{eB}{\pi^2} \operatorname{Im} \left[ (\omega + i\eta) \int_0^{+\infty} d\beta \frac{e^{-\beta z}}{1 - e^{-2eB\beta}} \right] \tag{4.93}
\end{aligned}$$

onde

$$g(y, z, f) = \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta z} \frac{e^{-y \coth(eB\beta)}}{1 - e^{-2eB\beta}} \int_0^{+\infty} d\varepsilon e^{-y \frac{\cosh \varepsilon}{\sinh eB\beta}} \frac{e^{-\left\{\frac{\Phi}{2\pi}\right\}(eB\beta+\varepsilon)}}{1 + e^{-(eB\beta+\varepsilon)}}. \tag{4.94}$$

Note que  $\rho_B(\vec{r}; \omega)$  e  $\rho_A(\vec{r}; \omega)$  se diferenciam unicamente na contribuição dos estados de modo-zero. Se  $\{\Phi/2\pi\} = 0$ , ou seja, quando não existe desbalanço de estados,  $\rho_B(\vec{r}; \omega)$  e  $\rho_A(\vec{r}; \omega)$  não dependem das coordenadas e, portanto, a densidade local de estados total  $\rho(\vec{r}; \omega) = \rho_B(\vec{r}; \omega) + \rho_A(\vec{r}; \omega)$  depende unicamente do campo magnético uniforme, em consonância com o estabelecido em [67]. Por outro lado, em um sistema com desbalanceamento de estado ( $\{\Phi/2\pi\} \neq 0$ ), ao substituir as expressões (4.92) e (4.93) em  $\rho(\vec{r}; \omega)$ , é possível mostrar que a densidade total de estados por intervalo de energia  $\rho(\omega) = \int \rho(\vec{r}; \omega) d^2\vec{r}$  pode ser simplificada como

$$\rho(\omega) = -\frac{e}{2} \left( -1 + 2e \frac{\Phi_B}{4\pi} \right) \delta(\omega), \tag{4.95}$$

a qual está relacionada à carga total induzida no sistema (que é um observável) na forma

$$Q = \int \rho(\omega) d\omega = -\frac{e}{2} \left( -1 + 2e \frac{\Phi_B}{4\pi} \right), \tag{4.96}$$

e que reproduz exatamente o resultado encontrado na seção anterior.

Portanto, vemos que o método da função de Green resulta muito útil já que permite estabelecer uma conexão direta entre o que acontece em nível de rede (a densidade local de estados medida através do STM) e algumas grandezas físicas que surgem em nível teórico (densidade de carga fermiônica) calculadas através de técnicas próprias da mecânica quântica. De fato, a possibilidade de considerar as contribuições de cada sub-rede por separado representou uma grande vantagem, pois em grafeno as componentes das subredes no espinor surgem naturalmente acopladas. Uma outra análise usando  $\rho_B$  e  $\rho_A$  pode ser realizada quando estudamos a quebra da simetria de inversão.

No grafeno, a simetria de inversão é quebrada quando as duas subredes se tornam inequivalentes. Este efeito é comum acontecer em sistemas de grafeno epitaxial, onde uma dopagem nas subredes é causada por um potencial químico que surge devido à presença do substrato. A principal consequência é a geração de um gap de energia neste tipo de sistemas, o que permitiria que a elaboração de dispositivos eletrônicos baseados em grafeno seja plausível.

Do ponto de vista do modelo contínuo, o termo de massa associado ao gap de energia, gerado depois de quebrar a simetria de inversão, é proporcional ao termo de massa  $\mu\alpha_3$  considerado na seção 3.2. Em ausência de tal massa, para qualquer configuração de  $B$  e  $B_5$ , a simetria de inversão é mantida. Ou seja, se espera

$$\begin{aligned}\rho_B - \rho_A &= \langle \bar{\Psi} \gamma^3 \Psi \rangle \\ &= 0,\end{aligned}\tag{4.97}$$

onde  $\langle \bar{\Psi} \gamma^3 \Psi \rangle$  é o condensado associado a equivalência entre as subredes, e portanto, pode ser usado para distinguir sistemas onde a simetria de inversão é quebrada. Particularmente, para  $B$  e  $B_5$  uniformes, não existe desbalanceamento de estados e portanto  $\rho_B = \rho_A$ , em consistência com (4.97). Porém, considerando  $B$  uniforme e  $B_5$  do tipo AB, nota-se que

$$\rho_B(\omega) - \rho_A(\omega) = \left(1 - \left\{ \frac{\Phi}{2\pi} \right\}\right) \delta(\omega),\tag{4.98}$$

o qual é uma consequência do desbalanceamento no número de estados de energia zero, devido unicamente a configuração escolhida para os campos  $B$  e  $B_5$ . Ainda não temos um argumento contundente para afirmar se existe ou não quebra da simetria de inversão neste sistema de grafeno com disclinação, pois (4.98) é válido sob certas características de  $B$  e  $B_5$ . Note também que integral  $\int [\rho_B(\omega) - \rho_A(\omega)] d\omega$  coincide com o resultado obtido para o número de vale  $N_v$ , isto por enquanto é considerado como uma peculiaridade deste sistema em particular e, portanto, requer maior análise.

# Capítulo 5

## Conclusões e Comentários

No 3º capítulo estudamos o papel que desempenham os modos-zero na obtenção de números fermiônicos induzidos. Mostramos que é possível realizar modos-zero fermiônicos com diversas estruturas espinoriais que levam ao fracionamento da carga fermiônica no caso de vórtices magnéticos com fluxo magnético finito e quantizado. Também consideramos os efeitos da introduzir termos constantes que levam a gaps de energia nos estados de uma única partícula, também de forma artificial, visto que a rede de grafeno não apresenta estes gaps de energia. Verificamos que os gaps de energia introduzidos no sistema não modificam as estruturas espinoriais dos estados de mínima energia (eles não possuem energia nula) quando comparadas com as estruturas espinoriais de energia nula que encontramos quando consideramos os efeitos de vórtices de campos magnéticos, e estes estados de mínima energia ainda levam à indução de número fermiônico no vácuo nessa  $EDQ_{2+1}$  estendida com simetria de gauge chiral  $U(1)$  local. Analisamos o processo de polarização do vácuo para construir a ação efetiva para os campos de gauge, no contexto relativístico, e verificamos a presença de termos do tipo Chern-Simons cruzados nessa  $EDQ_{2+1}$ . Neste caso, a corrente fermiônica anômala induzida calculada por meio de teoria de perturbação, exibe uma dependência similar com o potencial químico e o termo de massa que quebra paridade, quando consideramos campos magnéticos homogêneos. A densidade de carga fermiônica depende dos campos eletromagnéticos conforme é mostrado em [31] e [32]. Dessa forma, estaria se realizando em nível teórico a anomalia de paridade em redes tipo colméia. A compatibilidade dos resultados obtidos nesses três casos (vórtices, campos magnéticos homogêneos e polarização do vácuo) dá validade aos resultados mostrados nesta tese.

No capítulo 4, é mostrado como a simetria de vale é quebrada na presença de campos pseudomagnéticos que têm sua origem em defeitos topológicos chamados de disclinações em uma rede do tipo grafeno. De fato, o campo pseudomagnético que aparece em uma rede de grafeno, tem sua origem nas deformações estruturais da própria rede quando submetidas a tensões ou defeitos topológicos; então os estudos desenvolvidos nos capítulos

3 e 4, constituem em contribuições ao estudo das influências de deformações estruturais específicas em redes de grafeno nas propriedades de condução.

As perspectivas futuras de nossa investigação são uma continuação natural aos estudos realizados nesta tese. Se propõem os seguintes objetivos:

- **Analisar a influência de campos pseudomagnéticos na quebra da simetria de inversão;** procurando aprimorar e generalizar a abordagem dada no final do capítulo 4.
- **O estudo do efeito Hall quântico em redes de grafeno tensionadas,** em que pretendemos mostrar que o efeito Hall quântico é possível graças ao campo pseudomagnético oriundo das tensões a que a rede estaria submetida.
- **Estudar a relação entre anomalia em 3+1 dimensões, o efeito Witten e a indução de carga fermiônica fracionária em presença de monopolos magnéticos de Dirac e de t'Hooft-Polyakov,** dando ênfase a aplicações em grafeno e isolantes topológicos.
- **Explorar a conexão entre anomalias em 3+1 e 2+1 em maior profundidade,** tendo em mente a aplicação em sistemas de dupla camada e tipo colméia com mais de um tipo de átomo, que exhibe a vantagem de ser um material volumar. Procuraremos estar a par dos desenvolvimentos recentes sobre o assunto de eletrodinâmica axiônica e estados fracionários, já que este é um assunto em franco desenvolvimento.

# Referências Bibliográficas

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zh, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, e A. A. Firsov, **Science**, **306**, 666 (2004).
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos e A. A. Firsov, **Nature** **438**, 197 (2005).
- [3] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer e P. Kim, **Nature** **438**, 201 (2005).
- [4] A. K. Geim, **Science**, **234**, 1530 (2009).
- [5] G. V. Semenoff, **Phys. Rev. Lett.** **53**, 2449 (1984).
- [6] F. D. M. Haldane, **Phys. Rev. Lett.** **61**, 1988 (2015).
- [7] J. González, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, **Nucl. Phys. B** **424**, 595 (1994).
- [8] S. L. Adler, **Phys. Rev.** **177**, 2426 (1969); J. Bell e R. Jackiw, **Nuovo Cimento** **60A**, 47 (1969).
- [9] Y. Nambu, **Phys. Rev. Lett.** **117**, 648 (1960); **Phys. Rev. Lett.** **4**, 380 (1960).
- [10] C.-Y. Hou, C. Chamon e C. Mudry, **Phys. Rev. Lett.** **98**, 186809 (2007).
- [11] R. Jackiw e S.-Y. Pi, **Phys. Rev. Lett.** **98**, 266402 (2007).
- [12] B. Seradjeh e M. Franz, **Phys. Rev. Lett.**, **101**, 146401 (2008).
- [13] C. Weeks e M. Franz, **Phys. Rev. B** **81**, 085105 (2010).
- [14] A. E. Obispo e M. B. Hott, **Phys. Rev. B** **89**, 165405 (2014).
- [15] A. J. Niemi e G. W. Semenoff, **Phys. Rept.** **135**, 99 (1986).
- [16] R. Jackiw e C. Rebbi, **Phys. Rev. D** **13** (1976) 3398.
- [17] H. B. Nielsen e P. Olesen, **Nucl. Phys. B** **61**, 45 (1973).



- [18] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, e S. Roth, **Nature** **446**, 60 (2007).
- [19] A. Cortijo e M. A. H. Vozmediano, **Nucl. Phys. B** **763**, 293 (2006).
- [20] F. de Juan, A. Cortijo, e M. A. H. Vozmediano, **Phys. Rev. B** **76**, 165409 (2007).
- [21] Y. A. Sitenko e N. D. Vlassi, **Nucl. Phys. B** **787**, 241 (2007).
- [22] F. Guinea, B. Horovitz, e P. LeDoussal, **Phys. Rev. B** **77**, 205421 (2008).
- [23] E.-A. Kim e A. H. Castro Neto, **Eur. Phys. Lett.** **84**, 57007 (2008).
- [24] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, e M. F. Crommie, **Science** **329**, 544 (2010).
- [25] F. De Juan, A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano, e A. Cano, **Nature Phys.** **7**, 810 (2011).
- [26] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, e F. Guinea, **Phys. Rep.** **496**, 109 (2010).
- [27] A. Cortijo, **Tese de doutorado em Ciências Físicas**, Universidad Carlos III de Madrid, 2007.
- [28] T. Fujita, M. B. A. Jalil, S. G. Tan, e S. Murakami, **Jour. Appl. Phys.** **110**, 121301 (2011).
- [29] C. Chamon, C. -Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S.-Y. Pi e G. Semenoff, **Phys. Rev. B** **77**, 235431 (2008).
- [30] R. Jackiw, **Phys. Rev. D** **29**, 2375 (1984).
- [31] S. Ryu, C. Mudry, C.-Y. Hou, e C. Chamon, **Phys. Rev. B** **80**, 205319 (2009).
- [32] A.N. Redlich, **Phys. Rev. Lett.** **52**, 18 (1984); **Phys. Rev. D** **29**, 2366 (1984).
- [33] F. Zhai, X. Zhao, K. Chang e H. Q. Xu, **Phys. Rev. B** **82**, 115442 (2010).
- [34] A. Rycers, J. J. Tworzydło e C. W. J. Beenakker, **Nature Phys.** **3**, 172 (2007).
- [35] A. E. Obispo e M. B. Hott, **Phys. Rev. B**, **91**, 035404 (2015).
- [36] A. Fasolino, J. H. Los e M. I. Katsnelson, **Nat. Materials** **6**, 858 (2007).
- [37] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov e A. K. Geim, **Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A.** **102**, 10451 (2005).

- [38] H. W Kroto, J. R. Heath, S. C O'Brien, R. F. Curl e R. E. Smalley, **Nature** **318**, 162 (1985).
- [39] L. V. Radushkevich e V. M. Lukyanovich, **Zurn Fisic Chim** **26**, 88 (1952).
- [40] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, **Science** **321**, 385 (2008).
- [41] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres e A. K. Geim, **Science** **320**, 1308 (2008).
- [42] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak, e A. K. Geim, **Phys. Rev. Lett.** **100**, 016602 (2008).
- [43] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao e C. N. Lau, **Nano Letters** **8**, 902 (2008).
- [44] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson e F. Guinea, **Phys. Rept.** **496**, 109 (2010).
- [45] F. Moraes, *Braz. J. Phys.* **30**, 2 (2000).
- [46] L. Ryder, *Quantum Field Theory* (Cambridge University Press 2ed, New York), (1996).
- [47] F. Mandl. e G. Shaw, *Quantum Field Theory* (John Wiley & Sons, New York), (1986).
- [48] Y. Aharonov e D. Bohm, **Phys. Rev.** **115**, 485 (1959).
- [49] J. González, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, **Nucl. Phys. B** **406**, 771 (1993).
- [50] J. K. Pachos, **Cont. Phys** **50**, 375 (2009).
- [51] Y. Aharonov e A. Casher, **Phys. Rev. A** **19**, 2461 (1979).
- [52] A. J. Niemi e G. W. Semenoff, **Phys. Rev. Lett** **51**, 23 (1983).
- [53] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman and A. A. Smirnov, **Eur. Phys. J. C** **32**, 119 (2003).
- [54] V. G. Bagrov. D. M. Gitman and V. B. Tlyachev, **J. Math. Phys.** **42**, 1933 (2001).
- [55] C. R. Hagen, **Phys. Rev. Lett.** **64**, 503 (1990).
- [56] C. R. Hagen, **Phys. Rev. D.** **48**, 5935 (1993).
- [57] U. Percoco and V. M. Villalba, **Phys. Lett. A** **140**, 105 (1989).
- [58] Y. A. Sitenko e N. D. Vlassi, **Nucl. Phys. B** **787**, 241 (2007).
- [59] G. Semenoff, **Phys. Rev. B** **83**, 115450 (2011).

- [60] C. Chamon, C. -Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S.-Y. Pi e A. P. Schnyder, **Phys. Rev. Lett** **100**, 110405 (2008).
- [61] R. MacKenzie e F. Wilczek, **Phys. Rev. D** **30**, 2260 (1984).
- [62] G. Semenoff, V. Semenoff e F. Zhou, **Phys. Rev. Lett.** **101**, 087204 (2008).
- [63] A. Raya e E. Reyes, **Phys. Rev. D** **82**, 016004 (2010).
- [64] A. Das e M. Hott, **Phys. Rev. D** **53**, 2252 (1996).
- [65] V. Gusynin, V. Miransky e I. Shovkovy, **Phys. Rev. D** **52**, 4718 (1995).
- [66] F. de Juan, A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano e A. Cano, **Nature Phys.** **7**, 810 (2011).
- [67] T. Ando, **J. Phys. Soc. Jpn.** **75**, 124701 (2006).
- [68] A. O. Slobodeniuk, S.G. Sharapov e V. M. Loktev, **Phys. Rev. B** **82**, 075316 (2010).
- [69] A. O. Slobodeniuk, S.G. Sharapov e V. M. Loktev, **Phys. Rev. B** **84**, 125306 (2011).
- [70] H. Bateman e A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions* (Mc Graw-Hill 2ed, New York), (1953).

# Capítulo 6

## Apêndice A

A expressão para a função de Green no caso particular tratado no capítulo 4 é calculada da equação (4.77). Explicitamente este é dada por

$$\begin{aligned}
 G^r(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = & \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{R}_{0,\nu_+} \\ \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \sum_{k=-[\Phi/2\pi]-1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \\ \mathcal{R}_{0,\nu_-} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega - |E_n| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{R}_{n,\nu_+} \\ \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=[\Phi/2\pi]}^{-\infty} \frac{1}{\omega - |E_{n,l}| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{R}_{n,\nu_+} \\ \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{k=-[\Phi/2\pi]}^{+\infty} \frac{1}{\omega - |E_n| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \\ \mathcal{R}_{n,\nu_-} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{k=-1-[\Phi/2\pi]}^{-\infty} \frac{1}{\omega - |E_{n,k}| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \\ \mathcal{R}_{n,\nu_-} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
 & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=[\Phi/2\pi]+1}^{+\infty} \frac{1}{\omega + |E_n| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{R}_{n,\nu_+}^* \\ \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \tag{6.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=\lceil \Phi/2\pi \rceil}^{-\infty} \frac{1}{\omega + |E_{n,l}| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{R}_{n,\nu_+}^* \\ \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
& \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{k=-\lceil \Phi/2\pi \rceil}^{+\infty} \frac{1}{\omega + |E_n| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \\ \mathcal{R}_{n,\nu_-}^* & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix} + \\
& \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{k=-1-\lceil \Phi/2\pi \rceil}^{-\infty} \frac{1}{\omega + |E_{n,k}| + i\eta} \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{2x2} & \mathcal{O}_{2x2} \\ \mathcal{R}_{n,\nu_-}^* & \mathcal{O}_{2x2} \end{pmatrix}, \tag{6.2}
\end{aligned}$$

onde  $\mathcal{O}_{2x2}$  representa a matriz nula  $2x2$  e

$$\mathcal{R}_{n,\nu_{\pm}} = \begin{pmatrix} R_{n,\nu_{\pm}}^2(r) & \mp i R_{n,\nu_{\pm}}(r) R_{n-1,\nu_{\pm}+1}(r) \\ \pm i R_{n-1,\nu_{\pm}-1}(r) R_{n,\nu_{\pm}}(r) & R_{n-1,\nu_{\pm}+1}^2(r) \end{pmatrix}. \tag{6.3}$$

O dois primeiros termos de (6.2) foram convenientemente separado e representam uma contribuição parcial dos estados de energia zero.