

DINÂMICA QUANTICA NÃO-RELATIVÍSTICA EM UM GÁS DE ELÉTRONS NÃO INTERAGENTES BIDIMENSIONAL CURVO

João Antônio Pereira (1)*; Pedro Henrique Souza (2); Letícia Alves da Silva (1)

¹ Instituto Federal de Minas Gerais - *campus* Bambuí

² Universidad Andrés Bello – Santiago, Chile

joaoantoniopereira530@email.com *Bolsista PIBIC

RESUMO

A teoria proposta por R. C. T. da Costa descreve que a dinâmica de uma partícula quântica em uma superfície curva resulta em um potencial geométrico que depende apenas de parâmetros intrínsecos à superfície. Sendo assim, as características deste potencial são provenientes do formato da superfície curva, o que demonstra uma certa relação de singularidade entre a superfície e o potencial. O presente trabalho tem o objetivo de utilizar a abordagem proposta por da Costa e analisar algumas superfícies curvas e quais os efeitos dos seus potenciais na dinâmica de partículas como os elétrons. Foram analisados os efeitos de curvatura de superfícies cilíndricas, esféricas e do tipo toro e, com isso, foi possível inferir quais as implicações destas superfícies na dinâmica quântica não-relativística.

Palavras-chave: superfície; quântica; potencial de superfície.

1 INTRODUÇÃO

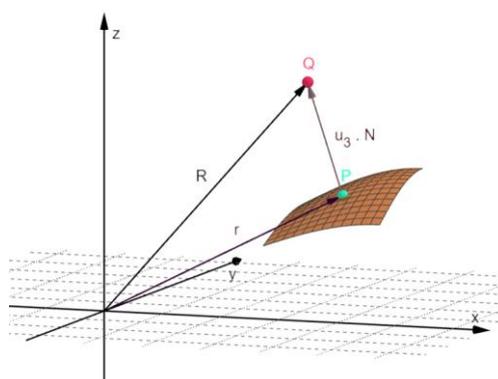
A partir da formulação da mecânica quântica, a sociedade moderna passou a experimentar diversos avanços tecnológicos, como computadores, celulares, transistores, etc., tornando a teoria quântica a mais precisamente testada e uma das teorias mais bem sucedidas da história da ciência (KLEPPNER; JACKIW, 2000).

A teoria de da Costa (1981) apresenta, com o uso da geometria diferencial, uma abordagem que possibilita o estudo de partículas quânticas em superfícies. Nessa teoria, para a descrição do potencial geométrico, define-se a porção de uma superfície parametrizada $\vec{r}(u_1, u_2)$ e, a cada ponto dessa superfície, associa-se um vetor normal $\vec{N}(u_1, u_2)$. Supondo que a partícula não pode sair da vizinhança dessa superfície, é possível descrever a posição da partícula por um vetor $\vec{R}(u_1, u_2, u_3)$ (Figura 1) dado por:

$$\vec{R}(u_1, u_2, u_3) = \vec{r}(u_1, u_2) + u_3 \vec{N}(u_1, u_2).$$

Para que seja possível confinar a partícula na superfície, supõe-se que, ao passo que a partícula tenta se afastar da superfície, é definido a existência de um potencial V , que atua sobre a partícula, e tende ao infinito ($V \rightarrow +\infty$) quando $u_3 \neq 0$, e que é nulo ($V = 0$) quando $u_3 = 0$. Dessa forma, nas proximidades da superfície, existe um potencial agindo de forma a manter a partícula na superfície. Esta abordagem proposta por da Costa Ihe resultou em mais de 600 citações, mostrando que sua teoria é utilizada de forma recorrente pela comunidade científica.

Figura 1 - Partícula na vizinhança da superfície



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

A equação de Schrödinger é uma equação diferencial cuja solução é uma grandeza chamada função de onda Ψ , que carrega informações quânticas da partícula como a energia, o momento linear e a posição, embora seja por uma descrição probabilística (GRIFFITHS, 2011):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi.$$

Escrevendo-se o operador laplaciano da equação de Schrödinger em coordenadas curvilíneas e utilizando-se da normalização da função de onda (que envolve uma mudança de variável para que seja possível construir a função de onda separável ($X = X_n \cdot X_t$), obtém-se uma equação de função de onda normal X_n e tangente X_t a superfície. Esta equação descreve o potencial geométrico quântico apenas conhecendo-se as curvaturas gaussianas e média. Este modelo, pode ser aplicado em um gás de elétrons bidimensional curvo onde as interações elétron-elétron podem ser negligenciadas, ou seja, elétrons não interagentes.

Além disso, foi demonstrado que flexões mecânicas que geram curvaturas em materiais 2D, podem ser usadas para controlar a condutividade elétrica e concentrações de cargas em alguns materiais como grafeno e fosforeno (YU; RUZSINSKY; PERDEW;

2016; JOGLEKAR; SAZENA, 2009), demonstrando que efeitos de curvatura podem ser observados no mundo real.

O presente trabalho tem o objetivo de compreender quais parâmetros de uma superfície curva influenciam na dinâmica de uma partícula quântica e apresentar as equações que regem a atuação do potencial destas superfícies, em especial, nas superfícies cilindro, esfera e toro.

2 METODOLOGIA

A metodologia utilizada será baseada em aplicações da abordagem proposta por da Costa, que faz o uso de conceitos da geometria diferencial aplicada na equação de Schrödinger. Assim, será possível descrever equações e mostrar quais parâmetros influenciam no potencial geométrico de acordo com cada superfície estudada.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Seguindo a abordagem proposta por da Costa, a equação de Schrödinger pode ser escrita como:

$$i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sqrt{g} (g_{ij}^{-1}) \frac{\partial X_t}{\partial u_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} [M^2 - K] X_t.$$

A partir dela, é possível descrever a dinâmica quântica de uma série de superfícies curvas, dado que o potencial efetivo é o termo descrito como $V_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2m} [M^2 - K]$, em que m é a massa da partícula, \hbar é a constante de Planck reduzida, M é a curvatura média e K a curvatura gaussiana. A seguir, serão apresentados os efeitos do potencial geométrico em superfícies cilíndricas de base circular, esfera e toro.

Seja a parametrização do cilindro conforme em Picado (2006),

$$X(u_1, u_2) = (r \cos(u_1), r \sin(u_1), u_2),$$

onde $r > 0$ é o raio do cilindro, $0 \leq u_1 < 2\pi$ é o parâmetro que varia o ângulo no plano xy e u_2 é o parâmetro que percorre a altura do cilindro.

Calculando os coeficientes da primeira forma fundamental g_{ij} , o determinante da matriz dos coeficientes $\det(g_{ij}) = g$, bem como a curvatura média e gaussiana do cilindro, pode-se determinar a equação de Schrödinger para o cilindro como

$$i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_2^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{4r^2} \right] X_t.$$

Assim, o valor do potencial geométrico efetivo do cilindro é dado por $V_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{4r^2} \right]$. Dessa forma, nota-se que o potencial tem relação inversa com o quadrado do raio da base do cilindro.

Considere a parametrização não global da esfera, descrita por

$$X(u_1, u_2) = (r \cos u_1 \sin u_2, r \sin u_1 \sin u_2, r \cos u_2),$$

em que $r > 0$ é o raio da esfera, $0 < u_1 < 2\pi$ é o parâmetro do ângulo de longitude e $0 < u_2 < \pi$ é o parâmetro que varia o ângulo de latitude (PICADO, 2006). Fazendo os cálculos para a equação de Schrödinger de forma análoga ao cilindro, porém conforme a parametrização da esfera, obtém-se a seguinte expressão

$$i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2 \sin^2 u_2} \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_1^2} + \frac{\cot u_2}{r^2} \frac{\partial X_t}{\partial u_2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_2^2} \right].$$

A equação acima demonstra que a esfera não produz um potencial de curvatura, uma vez que todos os termos estão associados a energia cinética.

Considere agora a parametrização do toro como

$$X(u_1, u_2) = ((R + r \cos u_2) \cos u_1, (R + r \cos u_2) \sin u_1, r \sin u_2),$$

em que $R > r > 0$, R é a distância do centro do tubo ao centro do toro, r é o raio do tubo, u_1 e u_2 são ângulos pertencentes ao intervalo $[0, 2\pi]$. Dessa forma, aplicando as operações na parametrização do toro, obtém-se

$$i\hbar \frac{\partial X_t}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{(R+r \cos u_2)^2} \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_1^2} - \frac{\sin u_2}{(R+r \cos u_2)r} \frac{\partial X_t}{\partial u_2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 X_t}{\partial u_2^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{r \cos^2 u_2 (R+r \cos u_2) - 2 \cos u_2}{4(R+r \cos u_2)r} \right] X_t,$$

ou seja, o potencial efetivo gerado pela superfície toro é

$$V_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{r \cos^2 u_2 (R+r \cos u_2) - 2 \cos u_2}{4(R+r \cos u_2)r} \right].$$

Observa-se que o potencial do toro depende de três variáveis que descrevem o toro, o raio interno do toro r , o raio externo R , e o ângulo u_2 entre os vetores r e R .

4 CONCLUSÃO

A partir da parametrização de uma superfície é possível estudar o potencial geométrico que influencia na dinâmica quântica de uma partícula.

O potencial gerado pelo cilindro apresentou uma dependência do inverso do quadrado de seu raio. Ou seja, para cilindros com raios muito extensos a partícula não sofre ação do potencial, de tal forma que o seu movimento é semelhante ao comportamento de uma partícula em uma superfície plana.

No caso da esfera, observa-se a ausência de um potencial geométrico. Sendo assim, a superfície esférica independentemente do seu raio, não interfere na dinâmica da partícula, uma vez que não existe o potencial ($V = 0$).

Por fim, para o potencial da superfície do tipo toro, foi constatado uma dependência do raio interno ao toro r , do raio externo do toro R e do ângulo u_2 .

AGRADECIMENTOS

Coloco aqui um agradecimento aos meus professores orientadores e ao IFMG *campus* Bambuí por fornecer a estrutura e recursos para fomentar a pesquisa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

COSTA, R. C. T. **Quantum mechanics of a constrained particle**. Physical Review A, APS, v. 23, n. 4, p. 1982, 1981.

GRIFFITHS, J. D. **Mecânica Quântica**. 2ª Ed. São Paulo: Pearson, 2011.

JOGLEKAR, Y. N.; SAZENA, A. **Curvature-induced p- n junctions in bent or folded bilayer graphene sheets**. Physical Review B, APS, v. 80, n. 15, p. 153405, 2009.

KLEPPNER, D.; JACKIW, R. **One hundred years of quantum physics**. Science, American Association for the Advancement of Science, v. 289, n. 5481, p. 893-898, 2000.

PICADO, J. **Apontamentos de Geometria Diferencial**. Universidade de Coimbra, Coimbra, v. 3, 2006.

YU, L.; RUZSINSKY, A.; PERDEW, J. P. **Bending two-dimensional materials to control charge localization and fermi-level shift**. Nano letters, ACS Publications, v. 16, n. 4, p. 2444-2449, 2016.