



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Pontos Quânticos Induzidos por Geometria em  
Superfícies com Deformações Gaussianas**

**César Ferreira de Freitas**

CAMPINA GRANDE

- Julho 2013 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Pontos Quânticos Induzidos por Geometria em  
Superfícies com Deformações Gaussianas**

**César Ferreira de Freitas**

Dissertação realizada sob a orientação do Prof.Dr. Cleverson Filgueiras, apresentada à Unidade Acadêmica de Física da Universidade Federal de Campina Grande em complementação aos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

CAMPINA GRANDE

- Julho 2013 -

F866p

Freitas, César Ferreira de.

Pontos quânticos induzidos por geometria em superfícies com deformações Gaussianas / César Ferreira de Freitas. – Campina Grande, 2013.

50 f.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2013.

"Orientação: Prof. Dr. Cleverton Filgueiras".

Referências.

1. Pontos Quânticos. 2. Curvaturas Médias e Gaussianas. 3. Potencial Geométrico. 4. Ponto Quântico. I. Filgueiras, Cleverton. II. Título.

CDU 530.145(043)

# PONTOS QUÂNTICOS INDUZIDOS POR GEOMETRIA EM SUPERFÍCIES COM DEFORMAÇÕES GAUSSIANAS

CÉSAR FERREIRA DE FREITAS

Aprovada em \_\_\_\_\_

## BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras  
UFCG - Campina Grande - PB  
Orientador

---

Prof.Dr. Lincoln Rodrigues Sampaio de Araújo  
UFCG - Campina Grande - PB  
Examinador

---

Prof.Dr. Caio Veloso Sátiro  
UFRPE - Garanhuns - PE  
Examinador

Dedico aos meus pais Cícero  
Alves e Maria Aparecida, e  
à minha amiga e companheira  
Francinalva Coelho Alves.

## AGRADECIMENTOS

Ao professor e amigo Dr. Cleverson Filgueiras pelo valioso auxílio na orientação desse trabalho, sendo um exemplar de professor que tenho como referência para o futuro.

Aos professores Dr. Francisco Brito e Dr. Eduardo Passos, pelo grande apoio que foi disponibilizado.

Aos professores Dr. Caio Veloso Sátiro e Dr. Lincoln Rodrigues por se disporem a participar da banca examinadora e pelas valiosas contribuições prestadas na melhoria desse trabalho.

Aos professores que ministraram com tanta dedicação e conhecimento as disciplinas obrigatória e optativas.

Aos colegas de curso, pois, sem os quais esta etapa acadêmica teria sido bem mais difícil de concluir.

A CAPES pelo suporte financeiro.

Aos meus pais.

A Francinalva Coelho Alves pelo apoio incondicional e compreensão durante esse período.

## RESUMO

Uma partícula quântica, sobre uma superfície bidimensional orientável, experimenta um potencial geométrico atrativo induzido, que é caracterizado por suas curvaturas média e Gaussiana. Neste trabalho investigamos o comportamento de elétrons em superfícies com deformações Gaussianas. Para superfícies apresentando saliências individuais, descobrimos que o potencial geométrico gera um anel quântico induzido pela geometria da superfície. Para superfícies com múltiplas deformações, as partículas quânticas podem ser presas em torno do centro de tais superfícies, o que gera um ponto quântico pela geometria induzida. Informações sobre as curvaturas média e Gaussiana são de grande importância para o entendimento do comportamento de determinada partícula quando ela está em uma superfície. Juntando essas informações com alguns conceitos da mecânica quântica, como equação de Schrödinger, análises de potencial e outros recursos, podemos obter equações que relacionam a energia potencial com as curvaturas média e Gaussiana. Os nossos resultados podem encontrar aplicações no contexto de semicondutores habituais, bem como em bicamadas de grafeno.

**Palavras Chaves:** Curvaturas média e Gaussiana, potencial geométrico, ponto quântico.

## ABSTRACT

A quantum particle, over a two-dimensional orientable surface, suffers the action of a geometric potential induced attractive, characterized by mean and Gaussian curvatures. In this work we investigate the behavior of electrons on surfaces showing Gaussian bumps. For surfaces showing single bumps, we find that the geometrical potential gives rise to a geometry-induced quantum ring. For surfaces with multiples bumps, quantum particles could be trapped around the center of those surfaces, which gives rise to a geometry-induced quantum dot. Information about mean and Gaussian curvatures are of great importance for the understanding of the behavior of a given particle when it on a surface to be. Joining this information with some concepts of quantum mechanics, as the Schrödinger equation, analysis of potential and other resources, we obtain equations that relate the potential energy with the mean and Gaussian curvatures. Our results can find applications in the context of usual semiconductors as well as in the context of bilayer graphene sheets.

**Key Words:** Mean and Gaussian curvature, geometric potential, quantum dot.



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Ponto Quântico</b>	<b>4</b>
2.1	Modelo . . . . .	7
2.2	Fabricação . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Introdução à Geometria Diferencial</b>	<b>12</b>
3.1	Teoria Local de Curvas . . . . .	12
3.2	Arranjo de polímeros . . . . .	17
3.3	Teoria Local de Superfícies . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Elétrons Confinados em uma Superfície Curva</b>	<b>24</b>
<b>5</b>	<b>Superfícies com Deformações Gaussianas Induzindo Pontos Quânticos</b>	<b>33</b>
5.1	Equação de Schrödinger para uma Partícula em uma Superfície Curva . . . . .	35
5.2	Algumas propriedades geométricas de superfícies . . . . .	35
5.3	Superfícies com Deformações Gaussianas . . . . .	39
5.3.1	Anéis quânticos Induzidos por geometria . . . . .	39
5.4	Ponto Quântico Induzido por Geometria . . . . .	41
<b>6</b>	<b>Conclusão e Perspectivas</b>	<b>45</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>47</b>

# Lista de Figuras

2.1	Interior de uma câmara de crescimento típico de um sistema MEB. Dentro das células de efusão ficam os elementos químicos (Ga, In, Al, As, por exemplo) que são aquecidos em temperaturas específicas. Em frente às células está o porta-substrato que recebe os feixes moleculares provenientes das células de efusão. Os obturadores podem interromper os fluxos sobre a superfície do substrato. Todo esse ambiente é mantido em ultra-alto vácuo por bombas de vácuo especiais (Figura retirada da referência [5]). . . . .	5
2.2	Uma junção p-n em equilíbrio com zero de tensão aplicada. Concentrações de elétrons e buracos são mostrados, respectivamente, com linhas azul e vermelha. Na região cinza, temos carga neutra. Zona vermelha é carregada positivamente. Zona azul é carregada negativamente. Sob a junção, temos a densidade de carga, o campo eléctrico e a tensão. . . . .	6
2.3	Fabricação de pontos quânticos. (1) um feixe de elétrons é lançado sobre a superfície de um semiconductor. (2) Uma camada metálica é depositada sobre a superfície. (3) Um solvente remove o excesso deixando apenas o metal onde o feixe de elétrons foi emitido (4). Íons reativos correm o material, exceto onde estar sendo protegido pelo metal (5), formando um ponto quântico (6). Quando uma tensão é aplicada aos eletrodos, o campo resultante repele os elétrons a partir da camada, deixando apenas em pequenas regiões. O grau de confinamento quântico nessas regiões pode ser manipulado alterando a tensão nos eletrodos (Figura retirada da referência [6]). .	10
3.1	Curva Poligonal . . . . .	13

3.2	Uma curva no espaço com os vetores $\vec{T}$ , $\vec{N}$ e $\vec{B}$ ; e o plano osculante gerado por $\vec{T}$ e $\vec{N}$ .	15
3.3	O triedro de Frenet-Serret movendo ao longo de uma hélice no espaço . . . . .	17
4.1	Sistema de coordenadas em uma superfície $S$ curva com equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$ . . . . .	25
4.2	A fita helicoidal com raio interno $\xi_0$ e raio externo $D$ . Para $\xi_0$ torna-se um hélice (Figura retirada da referência [19]). . . . .	30
4.3	Seção bidimensional (catenoide) da geometria de um buraco de minhoca tridimensional com o seu eixo ao longo de $z$ e garganta de raio $R$ (Figura retirada da referência [20]). . . . .	31
5.1	Superfícies com deformações Gaussiana : <b>(a)</b> $h(r) = h_0 e^{-\frac{r^2}{2a^2}}$ e <b>(b)</b> $h(r) = h_0 r^2 e^{-\frac{r^2}{2a^2}}$ . . . . .	36
5.2	Em <b>(a)</b> e <b>(b)</b> temos a imagem de ambos os potenciais geométricos mostrando a região com maior densidade como anel. <b>(c)</b> e <b>(d)</b> são os gráficos da curvatura média, curvatura Gaussiana e o potencial geométrico das superfícies; no primeiro caso, a curvatura Gaussiana conduz à existência de um anel, enquanto que no segundo a curvatura média parece assim contribuir com para a formação do anel. . . . .	40
5.3	<b>(a)</b> Superfície de dada por $h(x, x) = h_0(x^2 - y^2)e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$ <b>(b)</b> Curvatura Gaussiana <b>(c)</b> Curvatura Média <b>(d)</b> Potencial geométrico induzido <b>(e)</b> Parcelas da densidade do potencial geométrico induzido. Existem vários mínimos, o mais profundo está em torno da origem do sistema de coordenadas. Podemos ter aqui um ponto quântico bidimensional induzido pela geometria. . . . .	41
5.4	<b>(a)</b> Superfície de dada por $h(x, x) = h_0 x y e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$ . <b>(b)</b> Curvatura Gaussiana <b>(c)</b> Curvatura Média <b>(d)</b> Potencial geométrico induzido <b>(e)</b> Parcelas da densidade do potencial geométrico induzido. Existem vários mínimos, o mais profundo está em torno da origem do sistema de coordenadas. Podemos ter aqui um ponto quântico bidimensional induzido pela geometria. . . . .	42

5.5 (a) Distribuição de múltiplas saliências. (b) Parcelas da densidade do potencial induzido pela geometria. . . . . 43

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo científico sobre as propriedades da matéria vem se intensificando em técnicas de microfabricação, tanto que atualmente é possível estudar não só sistemas mesoscópicos, mas também sistemas nanoscópicos. Com isso abre-se a possibilidade de compreendermos melhor sistemas onde fenômenos quânticos atuam. Ao passo do desenvolvimento tecnológico, vemos claramente a procura da miniaturização com o melhor desempenho de dispositivos optoeletrônicos. Assim, a manipulação de elétrons por óptica [1] nos fornece aplicações de semicondutores na fabricação de dispositivos optoeletrônicos bem como no estudo da spintrônica (tecnologia que explora a propensão quântica dos elétrons de girar, assim como fazer uso do estado de suas cargas).

Neste contexto, é necessário entender o comportamento de sistemas de pequeno porte sob a influência de excitações externas [2]. Com isso, iniciou-se o estudo de semicondutores, que são caracterizados por terem uma banda de valência cheia e uma banda de condução vazia, e suas aplicabilidades na tecnologia atual, tal como na fabricação de LEDs (*Light Emitting Diode*) e outros dispositivos eletrônicos e ópticos.

Para tanto, houve a necessidade de estudar o comportamento dos elétrons em determinados materiais. Como exemplo, temos a transmissão de elétrons da banda de valência para a banda de condução. A troca de elétrons entre estas bandas depende diretamente do tamanho do gap. Para os metais que têm bandas sobrepostas temos a passagem livre dos elétrons diferentemente dos isolantes, que tem a ultima banda completamente cheia, que mesmo com alguma excitação de um campo externo não mudará o momento total dos elétrons. O número

de elétrons que passa da banda de valência para a banda de condução depende da temperatura e da energia que separa as duas bandas. Para os semicondutores essa energia é relativamente pequena, o que possibilita um maior fluxo de elétrons, mesmo à temperatura ambiente. Mas, a condução no semiconductor fica condicionada à energia de excitação dos elétrons, dependendo diretamente da temperatura. Porém, com o passar do tempo, percebeu-se que para um melhor desempenho dos dispositivos baseados em semicondutores, é necessário reduzir a temperatura. Com isso, surgiram novas técnicas de fabricação, como por exemplo, a que é baseada na dopagem de outros materiais, o que permite a redução do tamanho do gap, facilitando a passagem de elétrons da banda de condução para a banda de valência, não precisando, assim, aumentar consideravelmente a temperatura do material.

Com o processo de dopagem, é possível criar linhas de condução, onde podemos prender os elétrons e restringir seus movimentos localmente. De modo similar, observamos o processo de fabricação do LED, que é baseado em heterojunções (junção formada por dois materiais intrinsecamente diferentes, podendo estes materiais ser metais, isolantes ou semicondutores) de materiais semicondutores com barreiras de potencial. Confinando elétrons e buracos numa camada extremamente fina, na ordem  $0,1 - 0,5\mu m$  de espessura[3]. O que acabamos de falar pode ser tratado como um exemplo de um poço de potencial, que ao reduzirmos as dimensões podemos tratá-lo como um ponto quântico, resultado do estudo de nanocristais de semicondutores.

Há duas razões para o interesse no estudo de formação de estruturas periódicas ordenadas nas superfícies cristalinas. Em primeiro, os avanços nas técnicas experimentais precisas, tais como microscopia eletrônica de transmissão, microscopia de tunelamento e microscopia de força atômica, permitem a investigação confiável e precisa de estruturas de superfície com periodicidade na ordem nanométrica. Em segundo lugar, a formação de estruturas ordenadas periodicamente em superfícies semicondutoras oferece a possibilidade de fabricação direta de nanoestruturas quânticas de semicondutores, fornecendo um potencial de confinamento para os elétrons na banda de condução e de buracos na banda de valência formando estruturas periódicas como anéis quânticos, fios quânticos, ou pontos quânticos.

Superfícies, curvas e pontos são definições matemáticas. No entanto, como veremos nos

capítulos seguintes, essas definições irão nos ajudar a obter a física que desejamos. Mas, para isso, devemos compreender um pouco de tais definições matemáticas. Em primeira vista, iremos falar um pouco sobre pontos quântico no capítulo 2, enquanto que no capítulo 3 iremos fornecer a base matemática para o nosso estudo de curvas e superfícies para prosseguirmos ao capítulo 4, onde mostraremos como a geometria proporciona a física, a partir do potencial estudado por da Costa[4]. No capítulo 5, iremos considerar algumas superfícies, e analisaremos suas implicações físicas, enquanto que no capítulo 6 concluímos nosso trabalho dando uma possível continuidade de pesquisa do nosso problema, tendo em vista as consequências físicas que tal continuidade pode gerar.

# Capítulo 2

## Ponto Quântico

A construção de dispositivos ópticos e eletrônicos, compostos de heterojunções, depende de determinadas técnicas de crescimento de materiais, as quais devem ser capazes de produzir estruturas de semicondutores de qualidade, como por exemplo, a epitaxia por feixe molecular (MEB), que permite um excelente controle da espessura, composição e dopagem de determinados materiais, possibilitando a fabricação de dispositivos com alta mobilidade eletrônica. Essa técnica citada é utilizada para o crescimento de cristais pela evaporação de materiais em um ambiente de ultra-alto vácuo, assegurando a integridade do feixe incidente e limita o nível de impurezas que possa incorporar no material. Com isso, as estruturas monocristalinas podem ser formadas com precisão atômica (Figura 2.1)[5].

As finas camadas semicondutoras, como as que referimos anteriormente utilizadas na confecção de dispositivos optoeletrônicos, podem ser compostas basicamente por uma junção  $p - n$  (Figura 2.2). Nesta junção, os elétrons livres da camada  $n$  passam para a camada  $p$  indo de encontro para os buracos que os capturam, fazendo assim da camada  $p$  negativamente carregada enquanto que a camada  $n$  torna-se positivamente carregada. Com o aprisionamento das cargas na camada  $p$  temos o surgimento de um campo elétrico permanente, o qual, ao tornar-se capaz de barrar os elétrons livres faz com que o processo alcance o equilíbrio.

Historicamente, foi nos anos de 1970 que teve início o estudo mais profundo dos semicondutores, quando pesquisadores dos laboratórios da Bell e IBM fizeram o primeiro poço quântico bidimensional por meio de técnicas epitaxiais, que podem produzir estruturas semicondutoras artificiais com excelente qualidade cristalina. Em 1980 foi possível a obtenção



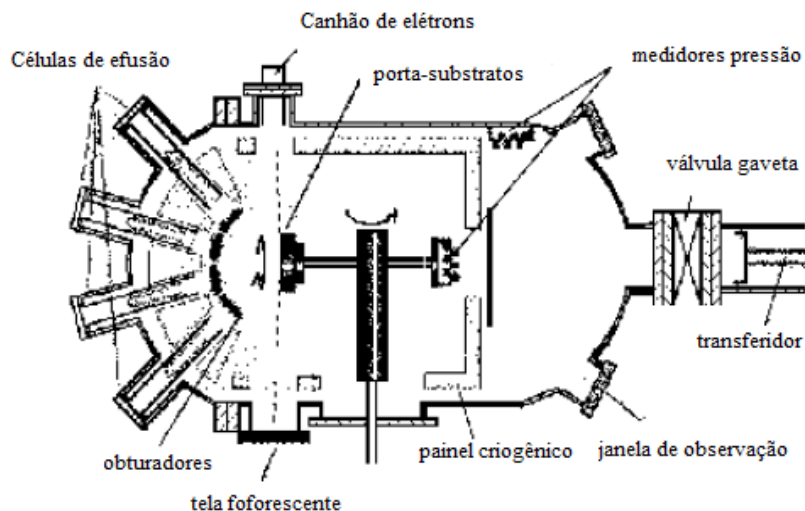


Figura 2.1: Interior de uma câmara de crescimento típica de um sistema MEB. Dentro das células de efusão ficam os elementos químicos (Ga, In, Al, As, por exemplo) que são aquecidos em temperaturas específicas. Em frente às células está o porta-substrato que recebe os feixes moleculares provenientes das células de efusão. Os obturadores podem interromper os fluxos sobre a superfície do substrato. Todo esse ambiente é mantido em ultra-alto vácuo por bombas de vácuo especiais (Figura retirada da referência [5]).

de um confinamento em um ponto por pesquisadores do Ioffe Physical-Technical Institute ao notar aspectos ópticos incomuns em cristalitos contendo selenetos de cádmio. Como o tamanho desses cristalitos é da ordem nanométrica e aprisionam partículas individuais em seu interior, eles podem ser interpretados como pontos quânticos [6]. Atualmente, temos diversas técnicas, entre as quais, podemos citar a epitaxia por feixe molecular, que é utilizada para fabricar multicamadas de semicondutores dopadas de impurezas. No entanto, foi possível não apenas confinar elétrons em um plano, mas também em um ponto. Assim, com o avanço de determinadas técnicas obteve-se em 1987 a primeira litografia de um ponto quântico. Antes da década de 1970, a pesquisa em ciência de estado sólido esteve restrita a materiais fornecidos pela natureza. O refinamento da epitaxia de camada ultrafina durante a década deu aos pesquisadores as ferramentas para a fabricação de estruturas bidimensionais que dominam a tecnologia de hoje. Com a descoberta dos nanocristalitos, perceberam que no processo de absorção de um fóton pode ocorrer a produção de dois ou mais elétrons. Possibilitando um

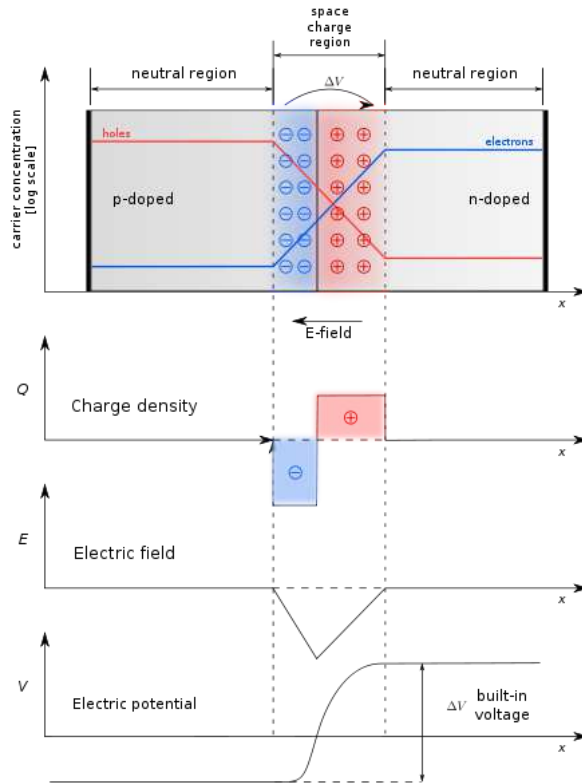


Figura 2.2: Uma junção p-n em equilíbrio com zero de tensão aplicada. Concentrações de elétrons e buracos são mostrados, respectivamente, com linhas azul e vermelha. Na região cinza, temos carga neutra. Zona vermelha é carregada positivamente. Zona azul é carregada negativamente. Sob a junção, temos a densidade de carga, o campo eléctrico e a tensão.

aumento no desempenho de dispositivos optoeletrônicos.

As células solares mostraram que pontos quânticos a partir de nanocristalitos de  $PbSe$  podem produzir de modo eficiente vários pares de elétron-buraco, conhecidos como éxcitons, uma quasipartícula eletricamente neutra existente em isolantes, semicondutores e em alguns líquidos. Contudo, as fortes interações fazem com que os elétrons de altas energias se tornem instáveis por alguns instantes antes de passarem para um estado mais estável [7, 8]. Caso o fóton seja emitido com energia maior que a energia do gap na região onde o campo eléctrico é não-nulo, teremos uma corrente através da junção, originando uma diferença de potencial denominada de Efeito Fotovoltaico. Além do gradiente de potencial eléctrico, temos o gradiente de concentração que produz uma corrente eléctrica num semiconductor. Este movimento de

portadores resulta em uma corrente de difusão. Quando a tensão através do poço corresponde à energia de um dos seus estados ressonantes, aumenta o fluxo de corrente. Se o diâmetro da coluna é muito pequeno, o seu espectro de corrente-tensão exhibe a série harmônica de picos que marca o confinamento quântico.

O comprimento de onda de um elétron depende de sua energia e de sua massa. Os potenciais electrostáticos dos átomos na rede cristalina sobrepõe-se para proporcionar um meio no qual as ondas se propagam com menor inércia do que no espaço livre. O limite de absorção óptica de nanocristalitos desloca-se para longe da extremidade vermelha do espectro. Em grupos de seleneto de cádmio, a progressão do vermelho escuro para o laranja e para o amarelo pode ser claramente visto a olho nu.

Com o avanço da ciência dos materiais, tornou-se possível a fabricação de pequenos dispositivos, por meio de ferramentas tecnológicas de nanofabricação capazes de criar estruturas quase átomo por átomo. Os pontos quânticos são feitos tipicamente através da formação de um gás de elétrons bidimensional na região de interface de heteroestruturas de semicondutores, por meio de um potencial electrostático limitando os elétrons a uma pequena região no plano de interface. Uma vez que o movimento electrónico é restrito em todas as três dimensões, um ponto quântico é formado, ou seja, como um sistema de dimensão zero. Assim, elétrons confinados em um plano não têm liberdade de movimento na terceira dimensão, enquanto aqueles que estão confinados num fio quântico são livres em apenas uma dimensão, e aqueles confinados em um ponto quântico não estão livres em qualquer dimensão.

A seguir iremos mostrar um modelo físico para um ponto quântico, tendo como base um anel bidimensional.

## 2.1 Modelo

Vamos agora apresentar um modelo teórico para um ponto quântico. Primeiro, comecemos com um anel quântico no plano  $X - Y$ , o qual pode ser modelado pelo potencial[9]

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.1)$$

onde  $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$ ,  $a_1$  e  $a_2$  são parâmetros reguláveis que servem para ajustar tanto o raio  $r$  como a largura do anel. Este potencial tem um mínimo em  $r = r_0 = (a_1/a_2)^{1/4}$ , que é o raio médio do anel. Para os elétrons em movimento  $r_0$ , o potencial tem uma forma parabólica, que é

$$V(r) \approx \frac{1}{2} m^* \omega_o^2 (r - r_o)^2, \quad (2.2)$$

onde  $\omega_o = \sqrt{8a_2/m^*}$  que caracteriza a resistência do confinamento transversal. De modo que, temos a largura do anel em função da energia de Fermi  $E_f$  dada por  $\Delta r = r_+ - r_-$ , onde

$$r_{\pm} = \left( \frac{V_0 + E_f \pm \sqrt{2E_f V_0 + E_f^2}}{2a_2} \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

Para energia muito baixa ( $E_f \ll V_0$ ), temos

$$\Delta r = \sqrt{\frac{8E_f}{m^* \omega_0^2}}, \quad (2.4)$$

O modelo definido por (2.1) é flexível, de modo que tanto o raio como a largura do anel podem ser ajustáveis, através de  $a_1$  e  $a_2$ . Assim, para  $r_0 = \text{constante}$  e  $\omega_0 \rightarrow \infty$ , temos um anel em 1D. Para  $r_0 \rightarrow \infty$  e  $\omega_0 = \text{constante}$ , temos um fio em 2D. Para,  $a_1 = 0$  temos um ponto quântico, enquanto que para  $a_2 = 0$  um anti-ponto quântico isolado, no qual, o potencial cria um conjunto de estados ligados discretos. Assim, quanto menor for o número quântico  $m$ , mais o estado pode sentir o potencial do anti-ponto quântico e, portanto, maior é a energia do estado.

Na presença de um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  perpendicular ao plano  $X-Y$  e um fluxo magnético  $\Phi = l\phi_0$  ( $\phi_0 = \frac{h}{e}$ ) passando pelo centro do anel 2D, o hamiltoniano do elétron é

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right) + \frac{e^2 B^2 r^2}{4\hbar} \right] + \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.5)$$

onde o potencial vetor é  $\vec{A} = \frac{1}{2} B r \hat{\varphi} + \frac{\hbar}{er} \hat{\varphi}$ . Assim, a energia é dada por

$$E_{n,m} = \omega \hbar \left( n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) - \omega_c \hbar \left( \frac{m-l}{2} \right) - \frac{m^* \omega_0^2 r_0^2}{4}, \quad (2.6)$$

onde  $n = 0, 1, 2, \dots$ , e  $m = \dots, -1, 0, 1, \dots$ .  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$  é a frequência ciclotron e  $M = \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2a_1 m^*}{\hbar^2}}$  o momento angular.

Os números quânticos  $n$  e  $m$  caracterizam o movimento radial e o momento angular, respectivamente. Em relação a um fio circular,  $n$  pode ser visto como o índice de sub-banda, e  $m$  o número quântico descrevendo o movimento longitudinal no fio.

## 2.2 Fabricação

O processo de produção de pontos quânticos pode ser feito através de várias técnicas. Uma das quais é por meio de uma camada de *AlGaAs*, cultivada sobre uma camada de *GaAs* por epitaxia de feixe molecular [5]. Acumulando elétrons na interface *GaAs/AlGaAs* de modo a formar um gás de elétrons bidimensional [10] (o seu movimento na direção vertical, está confinado ao estado mais baixo de um poço quântico). Por meio da litografia de feixes de elétrons, placas metálicas são formadas na parte superior da estrutura. A polarização negativa aplicada à parte superior da estrutura esgota os elétrons sob a placa e os restringe a uma pequena região, formando um gás de elétrons bidimensional por meio de dois contatos pontuais individualmente reguláveis (Figura 2.3). Aplicando uma tensão, podemos confinar elétrons em uma região muito pequena, de modo a formar um ponto quântico. O tamanho e a forma [11] desse ponto pode ser controlada pela tensão aplicada nas extremidades do substrato. Aumentando o potencial elétrico, temos a redução do tamanho do ponto e o aumento da energia. Essa capacidade de controle nos possibilita estudar uma faixa contínua de situações físicas, que tem uma ampla aplicação no meio tecnológico.

Um ponto quântico pode ser analisado como uma pequena parcela de matéria, que se comporta como um átomo artificial, que ao retirarmos ou adicionarmos elétrons, alteramos sua estrutura. Usualmente, um ponto quântico é obtido a partir do confinamento de um gás de elétrons bidimensional entre duas camadas bastante finas de materiais semicondutores, de preferência o seleneto de cádmio (*CdSe*), que absorvem fótons de luz ultravioleta e reemitem

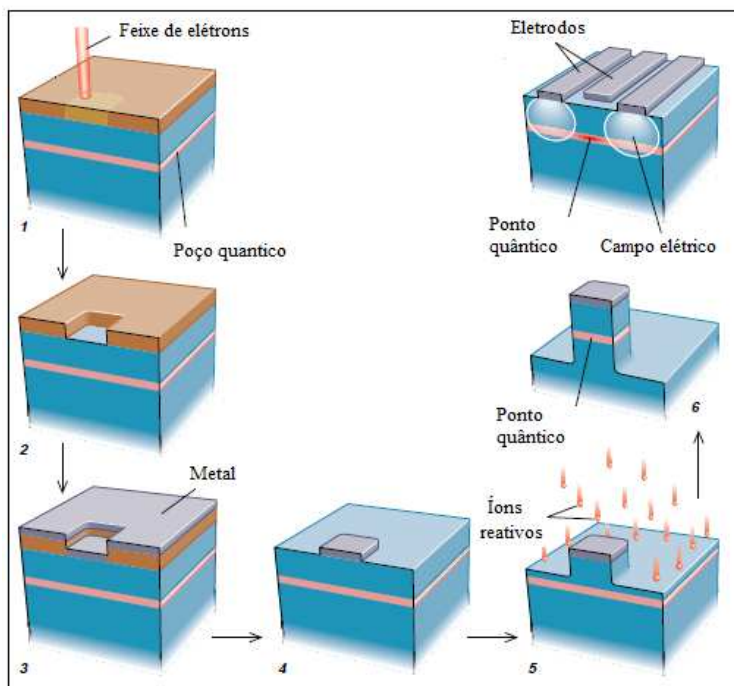


Figura 2.3: Fabricação de pontos quânticos. (1) um feixe de elétrons é lançado sobre a superfície de um semicondutor. (2) Uma camada metálica é depositada sobre a superfície. (3) Um solvente remove o excesso deixando apenas o metal onde o feixe de elétrons foi emitido (4). Íons reativos correm o material, exceto onde estar sendo protegido pelo metal (5), formando um ponto quântico (6). Quando uma tensão é aplicada aos eletrodos, o campo resultante repele os elétrons a partir da camada, deixando apenas em pequenas regiões. O grau de confinamento quântico nessas regiões pode ser manipulado alterando a tensão nos eletrodos (Figura retirada da referência [6]).

em forma de luz visível, variando a cor de acordo com o seu tamanho.

Para observar o confinamento da carga no ponto, duas condições devem ser satisfeitas. Em primeiro lugar, as barreiras devem ser grande o suficiente para que a passagem seja pequena, fazendo com que a carga seja quase que completamente isolada em um ponto. Em segundo lugar, a temperatura deve ser suficientemente baixa para que os efeitos da quantização da carga não sejam retirados [12]. Os autores da referência [13], relatam que para nanocristais de *PbS* sintetizados no regime de forte confinamento quântico, o rendimento é de 70% a temperatura ambiente.

O confinamento de um elétron em um ponto pode ser impedido pela repulsão de Coulomb clássica, com condutância pequena. Este fenômeno é conhecido como bloqueio de Coulomb.

Mas, alterando a tensão na placa metálica, podemos compensar essa repulsão, e o valor da tensão será tal que a condutância elevará a um máximo. Em geral, a energia dos elétrons em um semicondutor é limitada pela sua temperatura e pelas propriedades do material.

O bloqueio de Coulomb é essencialmente um fenómeno clássico, observado à baixas temperaturas em comparação com a energia de carga. A singularidade dos níveis do ponto torna-se importante no regime quântico quando a temperatura cai significativamente. Esta estrutura dá o controle de muitas das variáveis que definem um ponto, incluindo o tamanho, o número de elétrons e transparência das barreiras de confinamento. Podendo também determinar os níveis de energia pela quantificação da carga do elétron.

Além disso, o processo de fabricação por litografia protege o ponto quântico de efeitos na superfície, pelo menos, em duas faces. A parte superior e inferior do ponto são interfaces de um cristal feitos por epitaxa. O pilar é electricamente condutor, tendo carga positiva interna ao pilar. Esta carga repele elétrons a partir da superfície para o seu interior, tendo assim um confinamento quântico. A região na qual os elétrons foram repelidos se torna um isolante, protegendo o ponto, o qual dependendo do tamanho dessa superfície. Assim, para pontos de diferentes tamanhos, temos diferentes espectros harmônicos.

Em átomos naturais, o confinamento dos elétrons é causado pela força eletrostática dirigida radialmente do núcleo, e as funções de onda dos elétrons são radialmente simétricas. Ao variar a tensão, é possível confinar vários elétrons em um ponto. O tamanho e o número de elétrons em cada ponto pode ser controlado, tal como a altura e espessura da barreira entre os pontos. Mas, a partir da capacitância de pontos individuais é possível capturar um único elétron em cada poço. Dessa forma, é possível adicionar digitalmente um único elétron por vez. Abrindo a possibilidade de fazer uma estrutura artificial planar em que todas as propriedades dos átomos constituintes podem ser controladas. Gerando uma rede cristalina, pois cada ponto quântico individual pode ser tratado como um átomo, já que exhibe níveis de energia análogos ao do átomo. Assim, podemos obter o espectro de energia ao considerar um termo harmônico além do de Coulomb [14]. Um fenómeno central em pontos quânticos fechados com grandes barreiras.

# Capítulo 3

## Introdução à Geometria Diferencial

A geometria diferencial tem se mostrado uma ferramenta poderosa no campo da física de semicondutores de baixas dimensões, tornando possível aplicações em sistemas bidimensionais curvos. Assim, é possível a fabricação de dispositivos quânticos em substratos com determinadas propriedades eletrônicas. A geometria diferencial de curvas e superfícies é caracterizada por dois aspectos: o primeiro é o estudo das propriedades locais das curvas e superfícies nas proximidades de um ponto, e o segundo é o estudo da influência das propriedades locais como um todo [15]. No entanto, iremos enfatizar o que se refere ao primeiro aspecto. Faremos agora uma breve explanação a cerca de curvas e superfícies, tendo como base as referências [15, 16, 17].

### 3.1 Teoria Local de Curvas

Consideremos inicialmente uma curva diferenciável parametrizada que seja uma aplicação diferenciável  $\alpha : I \rightarrow R^3$  de um intervalo aberto  $I = (a, b)$  da reta real  $R$  em  $R^3$ .

$$\vec{\alpha}(t) = (x(t), y(t), z(t)), \quad (3.1)$$

onde,  $x(t), y(t), z(t)$  são funções reais definidas em  $I$  para  $t \in I$ .

Temos que  $\vec{\alpha}$  é uma correspondência que leva cada  $t \in I$  em um ponto  $\vec{\alpha}(t) = (x(t), y(t), z(t)) \in R^3$ , de tal modo que as funções reais  $x(t)$ ,  $y(t)$  e  $z(t)$  são diferenciáveis. Ou



seja, se  $\alpha(u)$  é uma função vetorial diferenciável em  $I$  e  $(u)$  é uma função real diferenciável de uma variável  $t$  cuja imagem está contida em  $I$ . Então

$$\frac{d(\|\vec{\alpha}(u(t))\|)}{dt} = \frac{d\alpha(u(t))}{du} \frac{du(t)}{dt} . \quad (3.2)$$

Desse modo observa-se que  $\vec{\alpha}' = \frac{d\vec{\alpha}}{dt}$  tem direção tangencial à curva ao fazer  $\Delta t \rightarrow 0$ ,

$$\vec{\alpha}'(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\vec{\alpha}(t + \Delta t) - \vec{\alpha}(t)}{\Delta t} , \quad (3.3)$$

assim, em  $t \in I$  para os quais o limite anterior existe, temos que  $\alpha'(t) = (x'(t), y'(t), z'(t))$  existe se  $x'(t), y'(t), z'(t)$  existir.

O vetor que aponta na direção tangente quando não-nulo, obtemos curvas regulares, nas quais  $\vec{\alpha}'(t)$  têm uma direção bem definida em cada parâmetro  $t$ . Supondo que a curva esteja definida num intervalo fechado  $[a, b]$ , temos  $\sum_{t=1}^m |\vec{\alpha}(t_i) - \vec{\alpha}(t_{i-1})|$ . Quanto maior o número de partições nesse intervalo, melhor será a aproximação do comprimento da curva (ver Figura 3.1).

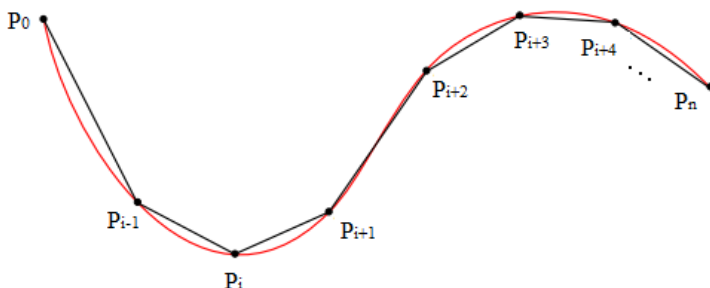


Figura 3.1: Curva Poligonal

Supondo que  $\vec{\alpha}(a) \neq \vec{\alpha}(b)$ , temos

$$L(\vec{\alpha}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n d(P_{i-1}, P_i) . \quad (3.4)$$

Se  $\vec{\alpha}$  for diferenciável, pelo Teorema do Valor Médio teremos que, para cada  $t_i, t_{i-1} \exists \lambda_i \in (t_i, t_{i-1})$  tal que  $x'(\lambda_i) = \frac{x(t_{i+1}) - x(t_i)}{t_{i+1} - t_i}$ , então

$$x(t_{i+1}) - x(t_i) = x'(\lambda_i) (t_{i+1} - t_i) . \quad (3.5)$$

Pela mesma razão,  $\exists \xi \in (t_i, t_{i-1})$  e  $\zeta \in (t_i, t_{i-1})$  tal que

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = y'(\xi) (t_{i+1} - t_i) , \quad (3.6)$$

$$z(t_{i+1}) - z(t_i) = z'(\zeta) (t_{i+1} - t_i) . \quad (3.7)$$

Sabendo que a distância entre dois pontos é dada por

$$d(P_{i+1}, P_i) = \sqrt{(x(t_{i+1}) - x(t_i))^2 + (y(t_{i+1}) - y(t_i))^2 + (z(t_{i+1}) - z(t_i))^2} \quad (3.8)$$

segue que

$$d(P_{i+1}, P_i) = \sqrt{(x'(\lambda_i) \cdot (t_{i+1} - t_i))^2 + (y'(\xi_i) \cdot (t_{i+1} - t_i))^2 + (z'(\zeta_i) \cdot (t_{i+1} - t_i))^2} \quad (3.9)$$

Como  $t_{i+1} > t_1$  para  $n \rightarrow \infty$ , obtemos

$$d(P_{i+1}, P_i) = (t_{i+1} - t_i) \sqrt{x'(C_i)^2 + y'(C_i)^2 + z'(C_i)^2} \quad (3.10)$$

$$d(P_{i+1}, P_i) = (t_{i+1} - t_i) \|\alpha'(C_i)\| . \quad (3.11)$$

Assim, temos  $L(\vec{\alpha}) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^n (t_{i+1} - t_i) \|\alpha'(C_i)\|$ , que é o limite da soma de Riemann de uma função  $f(t) = \|\alpha'(C_i)\|$  com relação a partição  $a = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n = b$  e os números  $C_1, C_2, \dots, C_n$  com  $C_i \in (t_{i+1} - t_i)$ , então

$$L(\vec{\alpha}) = \int_a^b \|\alpha'(t)\| dt , \quad (3.12)$$

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

Consideremos uma curva plana parametrizada por  $(x(t), y(t))$ , o seu vetor tangente  $\vec{\alpha}'$  forma um ângulo  $\theta(t)$ . Neste caso a curvatura pode ser interpretada como a taxa de variação

por unidade de comprimento de arco de  $\theta(t)$  formado por  $\vec{\alpha}'$  em uma dada direção. Temos simplesmente  $k(t) = |\vec{\alpha}''(t)|$ .

Para uma reta, por exemplo,  $k = 0$ , já que ao parametrizarmos a curva com vetor tangente constante, sua segunda derivada anula-se.

Podemos definir  $\vec{T}$  como o vetor tangente à curva e  $t$  como o arco de circunferência ao longo da curva. Também,  $\vec{N}$  é o vetor unitário normal, e  $\vec{B}$  o vetor unitário binormal, que é o produto transversal de  $\vec{T}$  e  $\vec{N}$  (Figura 3.2).

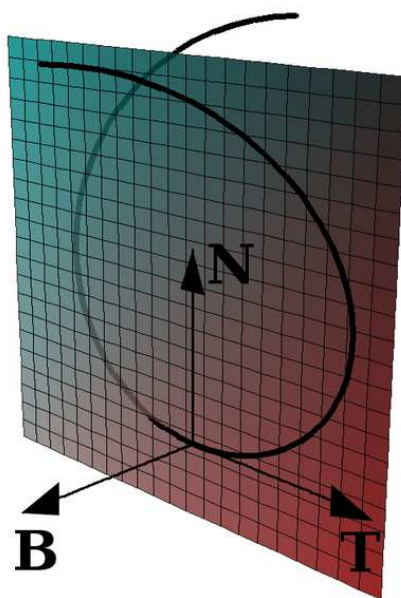


Figura 3.2: Uma curva no espaço com os vetores  $\vec{T}$ ,  $\vec{N}$  e  $\vec{B}$ ; e o plano osculante gerado por  $\vec{T}$  e  $\vec{N}$ .

Como já sabemos, a magnitude da taxa de mudança de  $\vec{T}$  é  $k$ , temos

$$\vec{T}'(t) = \frac{\vec{\alpha}''(t)}{\|\vec{\alpha}'(t)\|}. \quad (3.13)$$

Através da equação (3.11), encontramos

$$\vec{T}'(t) = k(s)\vec{N}(t). \quad (3.14)$$

Notemos que  $\vec{T} \cdot \vec{N}(t) = 0$ , uma vez que  $\vec{T}' \perp \vec{N}(t)$ . Ao nos movermos ao longo de  $t$ , o vetor unitário normal muda de direção, alterado por rotatividade ou para longe a partir

do vetor tangente. Ao passo que  $\vec{N}'(t) \perp \vec{N}(t)$ , apresentamos um terceiro vetor unitário  $\vec{B}(t) = \vec{T}(t) \times \vec{N}(t)$ , para explicar as mudanças no plano oscular. Então

$$\vec{B}'(t) = \vec{T}'(t) \times \vec{N}(t) + \vec{T}(t) \times \vec{N}'(t) = k(t)\vec{N}(t) \times \vec{N}(t) - k(t)\vec{T}(t) \times \vec{T}(t) + \tau(t)\vec{T}(t) \times \vec{B}. \quad (3.15)$$

De modo que pode mos escrever

$$\vec{B}'(t) = -\tau(t)\vec{N}(t), \quad (3.16)$$

onde  $\tau(t)$  é definido como torção da curva. Calculemos agora  $\vec{N}'$ , temos

$$\vec{N}(t) = \vec{T}(t) \times \vec{B}(t), \quad (3.17)$$

com isso, obtemos

$$\vec{N}'(t) = \alpha(t)\vec{T}(t) + \tau(t)\vec{B}(t). \quad (3.18)$$

Como  $\vec{T}(t) \cdot \vec{N}(t) = 0$ , temos que  $\alpha(t) = -k(t)$ , então

$$\vec{N}'(t) = -k(t)\vec{T}(t) + \tau(t)\vec{B}(t). \quad (3.19)$$

Assim temos as equações de Frenet-Serret para uma curva em três dimensões em sua forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \vec{T}'(t) \\ \vec{N}'(t) \\ \vec{B}'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k(t) & 0 \\ -k(t) & 0 & \tau(t) \\ 0 & -\tau(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{T}(t) \\ \vec{N}(t) \\ \vec{B}(t) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

As fórmulas de Frenet-Serret nos dizem que, ao percorrermos uma curva, o sistema de coordenadas está em constante movimento, assim sendo sempre não-inercial, uma vez que a tríade ortogonal pode ser girada.

Propondo que o traço de  $\alpha(t) : I \rightarrow \mathfrak{R}^3$  seja um arco circular de raio  $r$  centrado em  $P_0$ , então  $|\alpha(s) - P_0|^2 = r^2$ . Assim, para todo  $s$ , onde  $\tau = 0$  temos que  $\langle \alpha(t) - P_0, b_o \rangle = 0$ . De

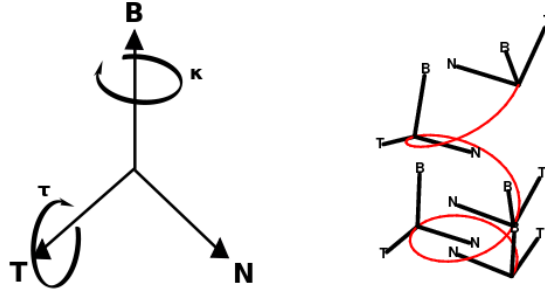


Figura 3.3: O triedo de Frenet-Serret movendo ao longo de uma hélice no espaço

modo que  $B(t) = b_0 = \text{constante}$ . Então  $\langle \alpha'(t), \alpha(t) - P_0 \rangle = \langle T(t), \alpha(t) - P_0 \rangle = 0$

Assim,  $\alpha(t) - P_0 = rN(t)$ . Implicando em  $\alpha'(t) = rN'(t) = T(t) = -rkT(t) \Rightarrow |k| = \frac{1}{r}$ .

Assim, podemos ver que  $k(t)$  é a taxa de rotação de  $\vec{T}(t)$  sobre  $\vec{B}(t)$  e,  $\tau(t)$  é visto como a taxa de rotação de  $\vec{N}(t)$  sobre  $\vec{T}(t)$ .

Como aplicação das equações de Frenet-Serret, observamos no caso das curvas planas que a torção é nula. Ou seja, dada uma curva  $\alpha(s) : I \rightarrow \mathfrak{R}^3$ , tal que  $k > 0$ ,  $s \in I$ . Temos que, se  $\alpha$  é plana existe um plano de  $\mathfrak{R}^3$  que contém  $\alpha(I)$ , este plano é conhecido como plano oscular de  $\alpha$ .

A seguir, vamos apresentar um exemplo Físico onde a teoria local de curvas se aplica.

### 3.2 Arranjo de polímeros

Na física, o problema de caminhos aleatórios é a base para a compreensão de muitos problemas. No entanto para polímeros devemos atribuir um custo de energia. Como vimos anteriormente, podemos criar uma curva a partir do quadro de Frenet-Serret, tendo apenas uma curvatura  $k(s)$  e uma torção  $\tau(s)$ , já que a tríade inicial ortogonal pode ser girada. Consideremos assim, a seguinte energia de uma curva [18]

$$E_{\text{curv}} = \frac{1}{2}A \int_0^L \left[ \frac{d\vec{T}(t)}{dt} \right]^2 dt, \quad (3.21)$$

onde  $A$  é um parâmetro de rigidez que depende do material. Para o nosso estudo, consideremos a função de partição de uma curva iniciando em  $\vec{T}(0) = \vec{z}$  e terminando em  $\vec{T}_L$ .

$$Z(\vec{T}_L) = \int_{\vec{T}(0)=\vec{z}}^{\vec{T}(L)=\vec{T}_L} e^{-E_{curv}(\vec{T})/k_B T} d\vec{T}. \quad (3.22)$$

Sabendo que  $\vec{T} = \frac{d\vec{\alpha}}{dt}$ . Temos

$$\vec{\alpha}(L) - \vec{\alpha}(0) = \int \frac{d\vec{\alpha}(t)}{dt} dt \quad (3.23)$$

$$\langle [\vec{\alpha}(L) - \vec{\alpha}(0)]^2 \rangle = \int_0^L dt \int_0^L dt' \left\langle \frac{d\vec{\alpha}(t)}{dt} \cdot \frac{d\vec{\alpha}(t')}{dt'} \right\rangle. \quad (3.24)$$

Da equação (3.20) e (3.19), fazendo  $t = is$ , obtemos

$$Z(\vec{T}_L, L) = \int_{\vec{T}(0)=\vec{z}}^{\vec{T}(L)=\vec{T}_L} [d\vec{T}] e^{\left\{ \frac{i}{k_B T} \int_0^{-iL} ds \left( \frac{d\vec{T}}{ds} \right)^2 \right\}}. \quad (3.25)$$

Como a solução da equação (3.23) é bastante complicada de ser obtida, podemos fazer uma analogia com a solução da equação de Schrödinger para uma única partícula, substituindo  $\hbar$  por  $k_B T$ ,  $A$  pela massa da partícula e  $\vec{T}$  pela posição. Com isso temos a seguinte equação:

$$-\frac{k_B T}{i} \frac{\partial Z}{\partial L} = -\frac{(k_B T)^2}{2A} \hat{L}^2 Z, \quad (3.26)$$

onde  $\hat{L}$  é o operador momento angular. Chamando  $L_p = \frac{2A}{k_B T}$ , temos

$$\frac{1}{i} \frac{\partial Z}{\partial L} = \frac{1}{2L_p} \hat{L}^2 Z. \quad (3.27)$$

Como o polímero é o mesmo ao longo de sua extensão, temos

$$\vec{T}(t) \cdot \vec{T}(t') = T(t)T(t') \text{Cos}(\theta(t-t')) = \vec{T}(t-t') \cdot \vec{T}(0) \quad (3.28)$$

assim, o valor médio é

$$\langle \vec{T}(t) \cdot \vec{T}(t') \rangle = \langle \text{Cos}(\theta(t-t')) \rangle = \left\langle \frac{d\vec{\alpha}(t)}{dt} \cdot \frac{d\vec{\alpha}(t')}{dt'} \right\rangle \quad (3.29)$$

Mudando para a cordenada original  $t$  em (3.25), sendo  $\hat{L}$  um operador Hermitiano, temos que

$$\frac{d \langle \cos(\theta(t-t')) \rangle}{d(t-t')} = \frac{1}{2L_p} \langle \hat{L}^2 \cos(\theta(t-t')) \rangle = \frac{-1}{L_p} \langle \cos(\theta(t-t')) \rangle \quad (3.30)$$

$$\langle \cos(\theta(s) - \theta(s')) \rangle = e^{\frac{-|s-s'|}{L_p}}. \quad (3.31)$$

Onde  $\hat{L}^2 \cos(\theta) = -2\cos(\theta)$  e  $\hat{L}^2(1) = 0$ . Substituindo essa expressão em (3.22), e resolvendo a integral, obtemos

$$\langle [\bar{\alpha}(L) - \bar{\alpha}(L)]^2 \rangle = 2L_p \left( L - L_p + L_p e^{\frac{-L}{L_p}} \right). \quad (3.32)$$

Da equação (3.30), temos que, a distância média quadrática que é percorrida é proporcional ao número de passos ou duração da caminhada nessa curva. Assim, observamos que  $\alpha^2 \propto LL_p$ . No entanto, ao realizarmos uma expansão, para  $L_p \gg L$ , vemos que  $\alpha^2 \propto L^2$ . Assim sendo, expandindo em série de Taylor até segunda ordem, temos

$$\langle [\bar{\alpha}(L) - \bar{\alpha}(L)]^2 \rangle \approx 2L_p \left[ L - L_p + L_p \left( 1 - \frac{L}{L_p} - \frac{L^2}{2L_p^2} \right) \right], \quad (3.33)$$

$$\langle [\bar{\alpha}(L) - \bar{\alpha}(L)]^2 \rangle \approx -L^2. \quad (3.34)$$

Como vimos anteriormente, para descrevermos uma curva é necessário conhecer apenas dois parâmetros, a curvatura  $k(t)$  e a torção  $\tau(t)$ . Desse modo, podemos escrever a energia do sistema à dependendo também do comportamento do polímero. Ou seja,

$$E = E_{curv} - E^* = \int_0^L dt \left\{ \frac{A}{2} k^2(t) + \frac{C}{4} k^4(t) - \frac{\sigma}{2} k^2(t) \tau(t) + \frac{\beta}{2} k^2(t) \tau^2(t) \right\}, \quad (3.35)$$

onde  $A$ ,  $C$ ,  $\sigma$  e  $\beta$  são positivas. Podemos dizer que, o custo energético para encurvar um dado material pode ser determinado a partir de dois parâmetros, a curvatura  $k(t)$  e a torção  $\tau(t)$ .

### 3.3 Teoria Local de Superfícies

Inicialmente, podemos dizer que uma superfície é um objeto geométrico do  $\mathfrak{R}^2$  contido em  $\mathfrak{R}^3$ . No espaço euclidiano  $\mathfrak{R}^3$ , dado um ponto  $p$  arbitrário de uma superfície  $S$ , temos três graus de liberdade [15, 16, 17]. Anteriormente vimos que a taxa de variação de uma reta tangente a uma curva nos dava a curvatura da mesma. Denotando  $\vec{X}_u = \frac{\partial \vec{X}}{\partial u}$  e  $\vec{X}_v = \frac{\partial \vec{X}}{\partial v}$ , temos que o vetor unitário normal  $\vec{N}$  é definido pela seguinte regra

$$\vec{N}(p) = \frac{\vec{X}_u \times \vec{X}_v}{|\vec{X}_u \times \vec{X}_v|}(q), \quad (3.36)$$

onde  $\vec{X} : U \subset \mathfrak{R}^2 \rightarrow S$  em  $p \in S$ , assim  $\vec{N} : \vec{X}(U) \rightarrow \mathfrak{R}^3$ .

Sabemos que um elemento de arco é dado por

$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i^2, \quad (3.37)$$

e o vetor tangente a uma curva contida na superfície é determinado por

$$\vec{X}' = \frac{d\vec{X}}{dt} = \frac{d\vec{X}}{du} \frac{du}{dt} + \frac{d\vec{X}}{dv} \frac{dv}{dt}. \quad (3.38)$$

Assim, temos que

$$ds^2 = \langle \vec{X}', \vec{X}' \rangle = \left( \frac{d\vec{X}}{du} \frac{du}{dt} + \frac{d\vec{X}}{dv} \frac{dv}{dt} \right) \cdot \left( \frac{d\vec{X}}{du} \frac{du}{dt} + \frac{d\vec{X}}{dv} \frac{dv}{dt} \right). \quad (3.39)$$

Desse modo, sabendo que  $g_{uv} = \vec{X}_u \cdot \vec{X}_v$ , ou seja,  $g_{11} = \vec{X}_1 \cdot \vec{X}_1$ ,  $g_{12} = \vec{X}_1 \cdot \vec{X}_2$ ,  $g_{21} = \vec{X}_2 \cdot \vec{X}_1$  e  $g_{22} = \vec{X}_2 \cdot \vec{X}_2$ , onde  $g_{12} = g_{21}$ . Temos a primeira forma fundamental dada por

$$ds^2 = I_p = g_{11}(u')^2 + 2g_{12}u'v' + g_{22}(v')^2. \quad (3.40)$$

De modo geral, para o espaço Riemaniano a métrica é definida por

$$ds^2 = \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n g_{uv} dx^u dx^v, \quad (3.41)$$

onde  $g_{uv} = g_{vu}$  e  $u, v = 1, 2, \dots, n$ .



Consideremos uma superfície regular com uma parametrização  $X(u(t), v(t))$  de  $S$  em  $P$ , sabendo que  $dN_p$  é linear auto-adjunta. Temos que a segunda forma quadrática de  $X$  é uma aplicação definida no plano tangente  $T_pS$ , então definimos  $II_p(\alpha') = -\langle dN_p(\alpha'), \alpha' \rangle$  como a segunda forma fundamental de  $S$  em  $p$ . De onde podemos escrever da seguinte forma

$$ds^2 = II_p = du^2 \langle \vec{N}, \vec{X}_{uu} \rangle + 2dudv \langle \vec{N}, \vec{X}_{uv} \rangle + dv^2 \langle \vec{N}, \vec{X}_{vv} \rangle . \quad (3.42)$$

Sabendo que  $\langle \vec{N}, \vec{X}_v \rangle = 0$ , temos

$$-\langle \vec{N}_u, \vec{X}_u \rangle = \langle \vec{N}, \vec{X}_{uu} \rangle , \quad (3.43)$$

$$-\langle \vec{N}_v, \vec{X}_u \rangle = \langle \vec{N}, \vec{X}_{uv} \rangle = \langle \vec{N}, \vec{X}_{vu} \rangle = -\langle \vec{N}_u, \vec{X}_v \rangle , \quad (3.44)$$

$$-\langle \vec{N}_v, \vec{X}_v \rangle = \langle \vec{N}, \vec{X}_{vv} \rangle . \quad (3.45)$$

Como as componentes  $\vec{N}_u$  e  $\vec{N}_v$ , podem ser escritas por

$$\vec{N}_u = a_{11}\vec{X}_u + a_{21}\vec{X}_v , \quad (3.46)$$

$$\vec{N}_v = a_{12}\vec{X}_u + a_{22}\vec{X}_v , \quad (3.47)$$

temos que

$$\langle \vec{N}_u, \vec{X}_v \rangle = a_{11}g_{12} + a_{21}g_{22} , \quad (3.48)$$

$$\langle \vec{N}_v, \vec{X}_u \rangle = a_{12}g_{11} + a_{22}g_{21} , \quad (3.49)$$

$$\langle \vec{N}_u, \vec{X}_u \rangle = a_{11}g_{11} + a_{21}g_{21} , \quad (3.50)$$

$$\langle \vec{N}_v, \vec{X}_v \rangle = a_{12}g_{12} + a_{22}g_{22} . \quad (3.51)$$

Na forma matricial, temos

$$-\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

de onde encontramos

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} = -\frac{1}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}^{-1} \quad (3.53)$$

onde  $g = \det(g_{ij}) = g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}$ , assim podemos obter a curvatura Gaussiana, que é dada por

$$K = \det(a_{ij}) = \frac{h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} = \frac{1}{g} \det(h_{ij}) , \quad (3.54)$$

que pode ser reescrita em termos das curvaturas principais  $k_1$  e  $k_2$  da seguinte forma

$$K = k_1 k_2 . \quad (3.55)$$

Calculemos a curvatura média, de modo que  $\det[dN_p + kI] = 0$  não seja invariante, assim

$$\det \left[ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \right] = \det \begin{pmatrix} a_{11} + k & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} + k \end{pmatrix} = 0 \quad (3.56)$$

$$a_{11}a_{22} + a_{11}k + a_{22}k + k^2 - a_{21}a_{12} = k^2 + k(a_{11} + a_{22}) + (a_{11}a_{22} - a_{11}a_{12}) = 0 \quad (3.57)$$

Resolvendo a equação quadrática anterior, temos as raízes expressas por  $k_1$  e  $k_2$ . Logo

$$M = \frac{1}{2} (k_1 + k_2) , \quad (3.58)$$

$$M = \frac{1}{2} \text{Tr}(a_{ij}) = \frac{1}{2} \frac{h_{11}g_{22} - 2h_{12}g_{21} + h_{22}g_{11}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} . \quad (3.59)$$

Se  $g_{12} = g_{21} = h_{12} = h_{21} = 0$ , temos que as curvaturas principais são dadas por  $k_1 = \frac{h_{11}}{g_{11}}$  e  $k_2 = \frac{h_{22}}{g_{22}}$ , logo

$$K = \frac{h_{11}h_{22}}{g_{11}g_{22}} , \quad (3.60)$$

$$M = \frac{1}{2} \frac{h_{11}g_{22} + h_{22}g_{11}}{g_{11}g_{22}} . \quad (3.61)$$

Com isso, podemos calcular  $k_1$  e  $k_2$  a partir das curvaturas  $K$  e  $M$ . Assim, através de  $k_1$  e  $k_2$  podemos classificar os pontos de uma superfície: Para  $K > 0$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são ambas negativas ou ambas positivas, isso nos dá um ponto elíptico; Para  $K < 0$ ,  $k_1$  e  $k_2$  possuem

sinais opostos, nos dando um ponto Hiperbólico; Para  $K = 0$  e  $H \neq 0$ , uma das curvaturas principais é nula e a outra não nula, temos um ponto Parabolico; Para  $K = 0$  e  $H = 0$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são ambas nulas, mostrando um ponto planar.

Geralmente calculamos a curvatura Gaussiana como sendo o produto das curvaturas principais, através da segunda forma fundamental. No entanto, o teorema Egregium mostra que a curvatura Gaussiana é uma característica intrínseca da superfície. Ele nos diz que: a curvatura Gaussiana  $K$  de uma superfície é invariante por isometrias locais.

Dada uma parametrização  $X(u, v)$  de uma superfície, as derivadas de segunda ordem de  $X$  são dadas por:

$$\vec{X}_{uu} = \Gamma_{11}^1 \vec{X}_u + \Gamma_{11}^2 \vec{X}_v + h_{11} \vec{N}, \quad (3.62)$$

$$\vec{X}_{uv} = \Gamma_{12}^1 \vec{X}_u + \Gamma_{12}^2 \vec{X}_v + h_{12} \vec{N}, \quad (3.63)$$

$$\vec{X}_{vu} = \Gamma_{21}^1 \vec{X}_u + \Gamma_{21}^2 \vec{X}_v + h_{21} \vec{N}, \quad (3.64)$$

$$\vec{X}_{vv} = \Gamma_{22}^1 \vec{X}_u + \Gamma_{22}^2 \vec{X}_v + h_{22} \vec{N}, \quad (3.65)$$

$$\vec{N}_u = a_{11} \vec{X}_u + a_{21} \vec{X}_v, \quad (3.66)$$

$$\vec{N}_v = a_{12} \vec{X}_u + a_{22} \vec{X}_v, \quad (3.67)$$

onde os  $\Gamma_{uv}^\beta$  são os simbolos de Christoffel, definidos por:

$$\Gamma_{uv}^\beta = \frac{1}{2} g^{\beta\lambda} \left( \frac{\partial g_{u\lambda}}{\partial q^v} + \frac{\partial g_{v\lambda}}{\partial q^u} + \frac{\partial g_{uv}}{\partial q^\lambda} \right). \quad (3.68)$$

De modo que a curvatura Gaussiana pode ser expressa da seguinte forma:

$$K = \frac{1}{g_{11}} [(\Gamma_{11}^2)_v - (\Gamma_{12}^2)_u + \Gamma_{12}^2 (\Gamma_{11}^1 - \Gamma_{12}^2) + \Gamma_{11}^2 (\Gamma_{22}^2 - \Gamma_{12}^1)]. \quad (3.69)$$

Mostrando que é possível calcular  $K$  em função apenas dos coeficientes da primeira forma fundamental e de suas derivadas, sendo assim invariante por isometria.

# Capítulo 4

## Elétrons Confinados em uma Superfície Curva

Neste capítulo, faremos uma breve revisão acerca da teoria desenvolvida por da Costa [4]. Primeiramente, faremos uma demonstração do potencial quântico gerado pela curvatura da superfície e em seguida comentaremos algumas aplicações.

Consideremos uma partícula de massa  $m$  ligada à uma superfície  $S$  com vetor posição  $\vec{r}$  de um ponto  $P$  arbitrário contido em  $S$ .

$$\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2) . \quad (4.1)$$

Levando em conta a parte de um espaço vizinho de  $S$  em torno de um ponto  $Q$ , podemos parametrizar na terceira coordenada em um ponto externo  $Q$  de  $S$  da seguinte forma:

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \vec{N}(q_1, q_2) , \quad (4.2)$$

onde  $\vec{N}$  define o valor levado de  $P$  através de uma unidade contínua normal à  $S$  (Figura 4.1).

Considerando um potencial  $V = V_\lambda(q_3)$  espacial, temos

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V(q_3) = \begin{cases} 0, & q_3 = 0 \\ \infty, & q_3 \neq 0 \end{cases} , \quad (4.3)$$

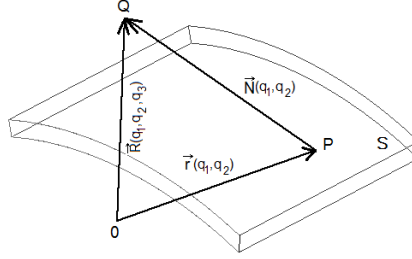


Figura 4.1: Sistema de coordenadas em uma superfície  $S$  curva com equação paramétrica  $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$

onde  $\lambda$  é um parâmetro de compressão. Ou seja, é possível ajustar  $V_\lambda$  em torno de  $P$  ajustando  $\lambda$ . Note que  $V_\lambda$  é um potencial tipo poço infinito.

Definindo  $g_{ij} = \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}\right) \cdot \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}\right)$ ,  $i, j, = 1, 2$ , as componentes covariantes do tensor métrico da superfície em questão e  $g = \det(g_{ij})$  e  $h_{ij} = h_{ji}$ , as componentes da segunda forma fundamental. Ao passo que as derivadas da normal  $\vec{N}(q_1, q_2)$  se localizam no plano tangente, temos

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial q_i} = \sum_j \alpha_{ij} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j} . \quad (4.4)$$

Assim,

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial q_i} = (\alpha_{11}q_1 + \alpha_{12}q_2) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} + (\alpha_{21}q_1 + \alpha_{22}q_2) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} . \quad (4.5)$$

Lembrando da segunda forma fundamental, obtemos

$$II = - \left\langle \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_1} q'_1 + \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_2} q'_2, \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} q'_1 + \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} q'_2 \right\rangle , \quad (4.6)$$

$$II = - \left[ \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} q'_1 + 2 \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} q'_1 q'_2 + \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} q'^2_2 \right] . \quad (4.7)$$

Temos que

$$-h_{11} = \frac{\partial \vec{N}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} = \alpha_{11} \left[ \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \right] + \alpha_{21} \left[ \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \right], \quad (4.8)$$

De modo análogo podemos obter as demais componentes  $-h_{12}$ ,  $-h_{21}$  e  $-h_{22}$ . Temos também

$$g_{11} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1}, \quad (4.9)$$

$$g_{12} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2}, \quad (4.10)$$

$$g_{21} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1}, \quad (4.11)$$

$$g_{22} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2}, \quad (4.12)$$

então

$$-h_{ij} = a_{ij} g_{ij}. \quad (4.13)$$

Que pode ser reescrita como

$$a_{ij} = -h_{ij} g_{ij}^{-1}, \quad (4.14)$$

de onde obtemos

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ \alpha_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \frac{-1}{g} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{22} & -g_{12} \\ -g_{21} & g_{11} \end{pmatrix}.$$

Assim, encontramos as equações de Weingarten expressas por

$$a_{11} = \frac{1}{g} [h_{21} g_{12} - h_{11} g_{22}] \quad (4.15)$$

$$a_{12} = \frac{1}{g} [h_{11} g_{21} - h_{21} g_{11}] \quad (4.16)$$

$$a_{21} = \frac{1}{g} [h_{22} g_{12} - h_{12} g_{22}] \quad (4.17)$$

$$a_{22} = \frac{1}{g} [h_{21} g_{12} - h_{22} g_{11}] \quad (4.18)$$

Através das equações (4.2) e (4.4), temos

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 [\delta_{ij} + a_{ij}q_3] \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} = \vec{N}(q_1, q_2) \quad (4.19)$$

Ao passarmos a analisar também o nosso espaço tridimensional, as componentes covariantes do tensor métrico para a nossa superfície  $S$  são dados por

$$G_{ij} = G_{ij} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j}, \quad (4.20)$$

Para  $i, j = 1, 2, 3$ . Por meio da equação (4.19), encontramos

$$G_{ij} = g_{ij} + q_3(h + h^T)_{ij} + q_3^2(aga^T)_{ij}, \quad (4.21)$$

onde  $G_{i3} = G_{31} = 0$ ,  $i = 1, 2$ ;  $G_{33} = 1$ .

Sabendo que o laplaciano pode ser escrito em coordenadas curvilíneas, então a equação de Schrödinger, nas coordenadas  $(q_1, q_2, q_3)$ , pode ser escrita por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} (\overline{G}^1)_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.22)$$

onde  $G = \det(G_{ij})$ . Observemos que o laplaciano, neste caso, pode ser dividido em duas partes, a parte da superfície  $i, j = 1, 2$  e a normal, definido por  $i = j = 3$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{G} (\overline{G}^1)_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_3} \left( \sqrt{G} (\overline{G}^1)_{33} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) \right\} + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.23)$$

Reorganizando os termos da equação (4.23) e lembrando que  $(\overline{G}^1)_{33} = G^1)_{33} = 1$  e denotando o  $D(q_1, q_2, q_3)$  como o operador laplaciano na superfície, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} D(q_1, q_2, q_3)\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial \ln \sqrt{G}}{\partial q_3} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) + V_\lambda(q_3)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.24)$$

Como a função dessa superfície depende apenas das variáveis  $q_1$  e  $q_2$ , devemos fazer uma separação de variáveis, introduzindo uma nova função  $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2)\chi_n(q_1)$ . A transformação adequada pode ser realizada por meio do volume em coordenadas curvilineas  $(q_1, q_2, q_3)$

$$dV = \sqrt{\det(G_{ij})} dq_1 dq_2 dq_3, \quad (4.25)$$

podendo ser reescrito da forma

$$dV = f(q_1, q_2, q_3)dSdq_3, \quad (4.26)$$

onde  $dS = \sqrt{g}dq_1dq_2$ . Usando a equação (4.21), calculamos  $\sqrt{\det(G_{ij})}$  e consequentemente  $f(q_1, q_2, q_3)$ , assim

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + Tr(a_{ij})q_3 + \det(a_{ij})q_3^2. \quad (4.27)$$

Da equação (4.26), temos o seguinte resultado

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = \sqrt{f(q_1, q_2, q_3)}\psi(q_1, q_2, q_3). \quad (4.28)$$

Substituindo esse resultado na equação (4.24), vemos

$$\frac{-\hbar^2}{2m}D\frac{\chi}{\sqrt{f}} - \frac{-\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial q_3^2}\frac{\chi}{\sqrt{f}} + \frac{\partial \ln \sqrt{G}}{\partial q_3}\frac{\partial}{\partial q_3}\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right\} + V_\lambda(q_3)\frac{\chi}{\sqrt{f}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{\chi}{\sqrt{f}} \quad (4.29)$$

Realizando algumas operações algébricas, encontramos

$$\sqrt{f}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}D\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} + \frac{\chi}{4f^2}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3}\right)^2 - 2f\frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2}\right] + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}. \quad (4.30)$$

Para  $\lambda \rightarrow \infty$ , temos duas barreiras de potencial, de modo que podemos considerar  $q_3 \rightarrow 0$ , exceto no termo contendo  $V_\lambda(q_3)$ . Assim, a partir das equações (4.21) e (4.27) teremos

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i,j=1}^2\frac{1}{g}\frac{\partial}{\partial q_i}\left[\sqrt{g}(\bar{g}^1)_{ij}\frac{\partial\chi}{\partial q_j}\right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\chi}{f^2}\left(\frac{1}{4}(Tr(a_{ij}))^2 + q_3Tr(a_{ij})\det(a_{ij}) + q_3^2(\det(a_{ij}))^2 - f\det(a_{ij}))\right)\right\} \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}, \end{aligned}$$

Desse modo, obtemos



$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{g} \frac{\partial}{\partial q_i} \left[ \sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q_j} \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \chi \left[ \frac{1}{4} (Tr(a_{ij}))^2 - det(a_{ij}) \right] \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi \\
 & = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} .
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

Para podermos encontrar o potencial geométrico devemos separar a equação (4.31) em duas partes. Definindo  $\chi = \chi_t(q_1, q_2, t) \times \chi_n(q_3, t)$ , onde os subscritos  $t$  e  $n$  significam tangente e normal respectivamente. Então,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t} , \tag{4.32}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{g} \frac{\partial}{\partial q_i} \left[ \sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_j} \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left[ \frac{1}{2} Tr(a_{ij}) \right]^2 - det(a_{ij}) \right\} \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t} . \tag{4.33}$$

A expressão (4.32) é a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula limitada no potencial  $V_\lambda(q_3)$ . A expressão (4.33) é bastante interessante, pois percebemos que o potencial depende diretamente da curvatura Gaussiana e curvatura média, conhecido como potencial geométrico ou potencial da superfície.

$$V_s(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left[ \frac{1}{2} Tr(a_{ij}) \right]^2 - det(a_{ij}) \right\} . \tag{4.34}$$

Sabendo que

$$M = \frac{1}{2} (k_1 + k_2) = \frac{1}{2} Tr(a_{ij}) = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) . \tag{4.35}$$

$$K = k_1 k_2 = det(a_{ij}) = \frac{1}{g} det(h_{ij}) . \tag{4.36}$$

Onde  $k_1$  e  $k_2$  são as curvaturas principais, intrínseca da curvatura da superfície. Assim, o potencial pode ser escrito da seguinte forma

$$V_s(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{8m} (k_1 - k_2)^2 . \quad (4.37)$$

A dependência de  $V_s$  em  $q$  se deve pela presença da curvatura média  $M$ , diferentemente da curvatura Gaussiana. Essa abordagem gera um potencial que depende tanto da curvatura Gaussiana como da curvatura média, a qual é obtida a partir equação de Schrödinger, assumindo que os portadores de carga estão ligados a superfície.

Vimos que o formato da superfície gera um potencial geométrico, através da equação de schrödinger, onde a função de onda é dividida em duas partes: a parte normal, que contém as energias infinitas exigidas pelo princípio da incerteza, e uma parte tangente que contém o potencial da superfície, dependendo tanto da curvatura Gaussiana como da curvatura média.

Se considerarmos, por exemplo, uma fita helicoidal [19], na qual se encontra uma partícula confinada, gerando um potencial efetivo induzido. Este potencial efetivo leva o aparecimento de estados localizados nas bordas da hélice.

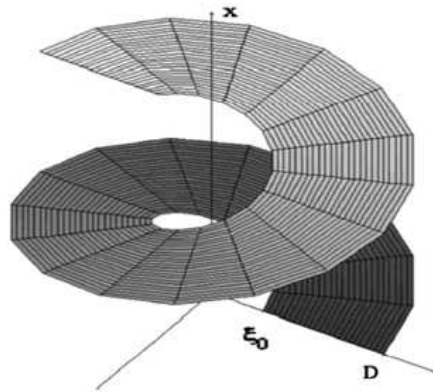


Figura 4.2: A fita helicoidal com raio interno  $\xi_0$  e raio externo  $D$ . Para  $\xi_0$  torna-se um hélice (Figura retirada da referência [19]).

Nesta geometria observamos o acúmulo de cargas de sinais opostos nas bordas. Efeito causado pela torção, que desempenha um papel similar ao de um campo elétrico transversal

sobre a superfície, podendo ser feita uma analogia com o Efeito Hall. Dessa maneira, um potencial na direção  $\xi$  é dado por

$$U(\xi) = -\frac{\hbar^2 \omega^2}{2m^*} \frac{1}{4} \left\{ \frac{1 - 4m^2}{1 + \omega^2 \xi^2} + \frac{1}{1 + \omega^2 \xi^2} \right\}, \quad (4.38)$$

onde  $m^*$  é a massa efetiva,  $\omega = \frac{2\pi n}{L}$ ,  $L$  é o comprimento da fita helicoidal. Temos um potencial atrativo para  $m = 0$ , concentração de elétrons na borda interna da fita helicoidal. Um potencial repulsivo para  $|m| \geq 1$ , concentração de elétrons na borda externa.

Para a geometria de uma catenóide [20].

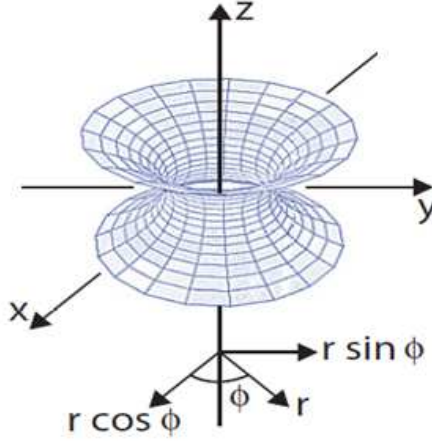


Figura 4.3: Seção bidimensional (catenoide) da geometria de um buraco de minhoca tridimensional com o seu eixo ao longo de  $z$  e garganta de raio  $R$  (Figura retirada da referência [20]).

O potencial geométrico pode ser escrito da seguinte forma

$$V(\zeta) = [m^2 - \epsilon \cosh^2(\zeta)] - \text{sech}^2(\zeta), \quad (4.39)$$

onde as curvaturas principais são  $k_1 = \frac{1}{R} \sec^2(z/R)$  e  $k_2 = -\frac{1}{R} \sec^2(z/R)$ . O comprimento  $\zeta = \frac{z}{R}$  e a energia  $\epsilon = \frac{2m_0 ER^2}{\hbar^2}$ .

Neste caso, o potencial é semelhante ao de um buraco de minhoca para  $m = 0$ . E para  $m \neq 0$  e positivo, temos um potencial invertido e duplo. Este problema pode ser

experimentado em folhas de bicamadas de grafeno.

Se ao invés da teoria de Schrödinger, considerarmos a teoria de Dirac [21]. Temos que a equação de Dirac em um (3 +1) dimensão espaço-tempo curvo, geralmente é dada por

$$(\gamma^A(\partial_A - \Gamma_A) + m) \Psi \equiv (\gamma^A D_A) \Psi = 0 . \quad (4.40)$$

Onde  $\Psi$  representa o campo spinorial de Dirac, e  $m$  representa a massa de repouso da partícula. Os  $\gamma^A$  são as matrizes que obedecem localmente a álgebra de Clifford  $\{\gamma^A, \gamma^B\} = 2\eta^{AB}$  com  $\eta_{AB} = e_A^a e_{Ba}$ . A matriz  $\Gamma_A$  é representada por

$$\Gamma = -\frac{1}{4}\gamma^A\gamma^B e_A^j (\partial_i e_{Bj} - e_B^k \Gamma_{kji}) . \quad (4.41)$$

onde  $\Gamma_{kji}$  representa os simbolos de Christoffel de segunda classe.

De modo que ao utilizarmos essa teoria, podemos obter o seguinte potencial

$$V_D = \frac{\hbar^2}{2m} K . \quad (4.42)$$

Comparando esse potencial  $V_D$  com o encontrado por meio da teoria de Schrödinger  $V_s$ , observamos uma diferença formal, enquanto que o potencial  $V_s$  depende tanto das curvaturas média e Gaussiana,  $V_D$  depende apenas da curvatura Gaussiana, ou seja é um dado físico que depende apenas das características intrínsecas da superfície que estamos trabalhando. Enquanto que esses dados são quantitativamente diferentes, temos que eles representam a mesma física, ou seja, são qualitativamente equivalentes.

## Capítulo 5

# Superfícies com Deformações Gaussianas Induzindo Pontos Quânticos

A partir de agora utilizaremos a teoria desenvolvida nos capítulos anteriores para descrever um sistema de partículas (gás de elétrons), que ao ser confinadas em uma superfície com deformações Gaussianas obteremos algo similar a um átomo, chamamos o resultado desse confinamento de ponto quântico [22].

A geometria diferencial tem um lugar importante na compreensão da natureza. Seu papel na Gravitação e Cosmologia é um fato bem estabelecido. Com os avanços tecnológicos ao longo dos anos, o papel da Geometria em Física da Matéria Condensada revelou também um importante ramo da pesquisa. Em sólidos tridimensionais, o comportamento de sistemas eletrônicos que mostram defeitos topológicos são tratados dentro da Teoria Geométrica de Defeitos [23]. Por outro lado, sistemas quânticos em duas dimensões são de grande interesse devido a uma variedade de fenômenos peculiares, como o efeito Hall quântico [24], efeito Hall quântico com spin (isolante topológico 2D) [25], correntes persistentes [26], efeito Aharonov-Bohm [27] e assim por diante.

Com a possibilidade de fabricação de substratos bidimensionais curvos em formas desejadas (nanotubos, rolos quânticos, anéis, tiras do tipo em espiral, etc) [28, 29], a Geometria Diferencial de superfícies têm sido explorada para diversas aplicações nesses sistemas. Uma

possibilidade é a investigação sobre a forma como geometria influencia esses fenômenos em duas dimensões [30]. Um outro caminho, que seguiremos aqui, é a investigação dos fenômenos induzidos pela geometria.

A aplicação da geometria em sistemas físicos, é um caminho natural para explorar a física em superfícies como cilindros, cones, esferas, catenóide, etc. Por exemplo, na referência [31], argumenta-se que a curvatura da superfície pode criar junções  $pn$  e controlar as propriedades eletrônicas locais em nanofitas de carbono e folhas de bicamada de grafeno. A transmissão de uma partícula quântica através da catenóide (geometria de um buraco de minhoca bidimensional) é prevista em [20]. Um estudo que faz lembrar o Efeito Hall, induzido geometricamente, é discutido em [19]. No contexto de uma monocamada de grafeno, fenômenos induzidos pela curvatura de superfície têm aplicações tais como em curvatura induzida pelas junções  $pn$ , abertura de band-gap (gap de energia) e decoerência [32]. O que nos interessa é a investigação de um gás de elétrons em superfícies deformadas. Os casos mais simples são aqueles em a geometria é deformada a partir de um substrato plano.

Assim, neste trabalho, investigamos elétrons em superfícies mostrando deformações Gaussianas (ver Figura 4.1). Estas superfícies especiais foram investigadas no contexto de cristais líquidos[18] (uma classe de materiais que se podem ser apresentados em estados da matéria compreendidos entre o Líquido e o Sólido), uma vez que a geometria também é importante no estudo de sistemas de Matéria Condensada Mole[33]. Podemos prever que os elétrons sobre estas superfícies experimentam potenciais geométricos que podem nos dar a localização deles.

Para superfícies com uma única deformação Gaussianiana, elétrons podem se localizar em estreitas regiões circulares, através da formação de anéis quânticos induzidos pela geometria[34]. Com mais de uma deformação, a situação é diferente uma vez que os potenciais geométricos não são invariantes por rotação. Neste caso, existem alguns mínimos, com um mais profundo localizado na origem do sistema de coordenadas, onde elétrons podem ser localizados. Dependendo do tamanho destas estruturas, a geometria em duas dimensões pode gerar pontos quânticos. Se temos elétrons confinados a dimensão zero, temos um ponto quântico[35]. Tais pontos possuem uma ampla gama de aplicações[36]: diodos de laser, células

solares, imagens médicas para detecção de doença, etc.

## 5.1 Equação de Schrödinger para uma Partícula em uma Superfície Curva

A mecânica quântica de uma partícula não-relativística restrita a mover-se sobre uma superfície orientável arbitrária foi apresentada no capítulo anterior. Vale ressaltar que este estudo foi realizado de maneira diferente nas referências[37]. A característica média desses trabalhos é que podemos escrever a equação de Schrödinger não apenas através do operador de Laplace-Beltrami [38] em termos de coordenadas curvilíneas da superfície, mas também considerando a existência de um potencial geométrico atrativo. Desta forma, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\hbar^2}{\sqrt{g}} \partial_\mu (\sqrt{g} g^{\mu\nu} \partial_\nu) \Psi + V_{\text{geo}} \Psi = E \Psi, \quad (5.1)$$

onde  $m^*$  é a *massa efetiva do elétron*,  $g^{\mu\nu}$  é a componente contravariante do tensor métrico e  $g = \det(g_{\mu\nu})$ . O último termo em (5.1) é o potencial da superfície [4],

$$V_{\text{geo}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} (M^2 - K), \quad (5.2)$$

onde  $M = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$  é a curvatura média e  $K = \kappa_1 \kappa_2$  é a curvatura Gaussiana da superfície;  $\kappa_1$  e  $\kappa_2$  são as curvaturas principais da superfície. Este potencial é puramente um resultado do confinamento de partícula e aplica-se no limite tendendo a zero da espessura da superfície bidimensional.

## 5.2 Algumas propriedades geométricas de superfícies

Neste trabalho, investigamos os elétrons em superfícies com deformações Gaussianas. Consideramos estas superfícies dadas geralmente pelo mapa

$$\vec{X} = (x, y, h(x, y)), \quad (5.3)$$

onde  $x, y \in \mathfrak{R}$  e  $h(x, y)$  é a *função da altura*. Queremos analisar o potencial geométrico (5.2). Para atingir este objetivo, devemos calcular a curvatura média e a curvatura Gaussiana de uma superfície curva dada pela equação (5.3) [15]. Assim, começamos a obtenção dos coeficientes da chamada *primeira forma fundamental*, isto é, a métrica induzida por (5.3), bem como os coeficientes da *segunda forma fundamental*.

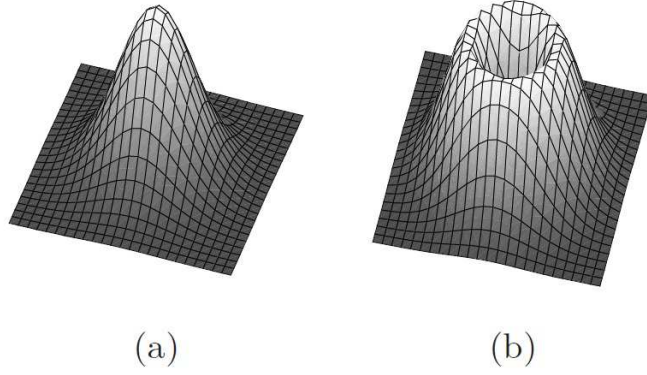


Figura 5.1: Superfícies com deformações Gaussianas : **(a)**  $h(r) = h_0 e^{-\frac{r^2}{2a^2}}$  e **(b)**  $h(r) = h_0 r^2 e^{-\frac{r^2}{2a^2}}$ .

No capítulo 3 vimos como calcular os coeficientes da primeira forma fundamental, desse modo para a nossa superfície temos

$$\begin{aligned}
 E &= g_{xx} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial x} = (1 + h_x^2) , \\
 F &= g_{xy} = g_{yx} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial y} = h_x h_y , \\
 G &= g_{yy} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial y} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial y} = (1 + h_y^2) ,
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

onde  $h_x = \partial_x h$ ,  $h_y = \partial_y h$ ,  $h_{xy} = \partial_{xy}^2 h$ ,  $h_{xx} = \partial_{xx}^2 h$  e  $h_{yy} = \partial_{yy}^2 h$ . Desta forma, a métrica induzida é dada por

$$ds^2 = (1 + h_x^2) dx^2 + 2h_x h_y dx dy + (1 + h_y^2) dy^2 . \tag{5.5}$$



O vetor unitário normal da superfície (5.3) é dado por

$$\hat{n} \equiv \frac{\vec{X}_x \times \vec{X}_y}{|\vec{X}_x \times \vec{X}_y|} = \frac{(-h_x, -h_y, 1)}{\sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2}}. \quad (5.6)$$

Em seguida, os coeficientes da segunda forma fundamental são

$$\begin{aligned} e &\equiv \frac{\partial^2 \vec{X}}{\partial x^2} \cdot \hat{n} = \frac{h_{xx}}{\sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2}}, \\ f &\equiv \frac{\partial^2 \vec{X}}{\partial x \partial y} \cdot \hat{n} = \frac{h_{xy}}{\sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2}}, \\ g &\equiv \frac{\partial^2 \vec{X}}{\partial y^2} \cdot \hat{n} = \frac{h_{yy}}{\sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2}}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

A curvatura média é dada por

$$\begin{aligned} M &= \frac{eG - 2fG + gE}{2(EG - F^2)} \\ &= \frac{1}{2} \frac{(1 + h_x^2)h_{yy} - 2h_x h_y h_{xy} + (1 + h_y^2)h_{xx}}{(1 + h_x^2 + h_y^2)^{3/2}} \end{aligned} \quad (5.8)$$

e a curvatura Gaussiana é

$$K = \frac{eg - f^2}{EG - F^2} = \frac{h_{xx}h_{yy} - h_{xy}^2}{(1 + h_x^2 + h_y^2)^2}. \quad (5.9)$$

Com estes resultados, o potencial geométrico (5.2) induzido pelo mapa (5.3) pode ser investigado.

Se considerarmos, ao invés de (5.3), a seguinte parametrização

$$\vec{X} = (r \cos \theta, r \sin \theta, h(r)), \quad (5.10)$$

onde  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  e  $h(r)$  a *função da altura*. Os coeficientes da primeira forma fundamental são

$$\begin{aligned}
 E &= g_{rr} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial r} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial r} = (1 + h'^2) , \\
 F &= g_{r\theta} = g_{\theta r} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial r} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial \theta} = 0 , \\
 G &= g_{\theta\theta} \equiv \frac{\partial \vec{X}}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \vec{X}}{\partial \theta} = r^2 ,
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

onde  $h' = \frac{\partial h}{\partial r}$ . Assim, a métrica é dada por

$$ds^2 = (1 + h'^2) dr^2 + r^2 d\theta^2 . \tag{5.12}$$

O *vetor unitário normal* da superfície (5.10) é dado por

$$\hat{n} = \frac{(-h' \cos\theta, -h' \sin\theta, 1)}{\sqrt{1 + h'^2}} . \tag{5.13}$$

Os coeficientes da segunda forma fundamental são

$$\begin{aligned}
 e &= \frac{h''}{\sqrt{1 + h'^2}} , \\
 f &= 0 , \\
 g &= \frac{r h''}{\sqrt{1 + h'^2}} .
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

A curvatura média é dada por

$$M = \frac{1}{2} \frac{h'' + r^{-1} h' (1 + h'^2)}{(1 + h'^2)^{3/2}} \tag{5.15}$$

e a curvatura Gaussiana é

$$K = \frac{h'' h'}{(1 + h'^2)^2} . \tag{5.16}$$

O potencial geométrico, pode ser escrito por

$$V_{\text{geo}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{h'^2 + r^{-2} h'^6 + 2r^{-2} h'^2 - 2r^{-1} h'' h'^3 - 2r^{-1} h'' h'}{4r (1 + h'^2)^3} \right] . \tag{5.17}$$

A equação Schrodinger é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{rr} \Psi - \frac{\hbar^2}{2m^* r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + V_{\text{geo}} \Psi = E \Psi , \quad (5.18)$$

onde  $\nabla_{rr} = \frac{1}{r\sqrt{1+\hbar^2}} \partial_r \left( \frac{r}{\sqrt{1+\hbar^2}} \right) \partial_r$ . Fazendo  $\Psi(\rho, \theta) = \psi(\rho) e^{i l \theta}$ , temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{rr} \psi + V(r) \psi = E \psi , \quad (5.19)$$

onde

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{l^2}{r^2} + V(\text{geo}) . \quad (5.20)$$

Dessa forma, podemos considerar o sistema como sendo composto de um elétron na direção  $r$  interagindo com o potencial total (5.19). A seguir, iremos abordar as implicações físicas de  $V_{\text{geo}}$ .

## 5.3 Superfícies com Deformações Gaussianas

### 5.3.1 Anéis quânticos Induzidos por geometria

Nesta seção, vamos rever alguns aspectos de elétrons em superfícies individuais com deformações (ver figura 5.1)[34]. Esta análise irá ajudar-nos a discutir e compreender os resultados da seção seguinte, quando investigamos superfícies com várias saliências. A principal diferença aqui é que analisamos o potencial quântico geométrico induzido em coordenadas cartesianas, em contraste com[34] onde os autores têm utilizado coordenadas cilíndricas.

Nas figuras (5.2a) e (5.2b), marcamos os potenciais geométricos para ambas as superfícies, (5.1a) e (5.1b). A partir deles, podemos ver que os elétrons (buracos) podem se localizar em uma região circular estreito em ambos os potenciais. Nas figuras (5.2c) e (5.2d), mostramos a curvatura média, a curvatura Gaussiana e os respectivos potenciais geométricos em coordenadas cilíndricas. Notamos que a região onde ocorre atração coincide com a região de curvatura Gaussiana negativa enquanto a de repulsão é a região com curvatura Gaussiana positiva. Assim, a região negativa implica em uma área dilatada e as funções de

onda têm mais espaço para se espalhar do que na região com curvatura Gaussiana positiva. Então, é por isso que podemos ter maior probabilidade de encontrar alguns elétrons na região parecida com anel. Para uma análise mais aprofundada nos preocuparemos com uma única saliência gaussiana, figura (5.1), para qual chamamos a atenção para a referência[34]. Usando coordenadas cilíndricas, os autores mostraram que as partículas com momento angular nulo são as únicas que podem ser localizadas nessa região em forma de anel. Partículas com momento angular não nulo são repelidos do centro da superfície. Eles também discutem possíveis superfícies rotacionalmente invariantes que permitem a localização dos elétrons em regiões em forma de anel com momento angular genérico.

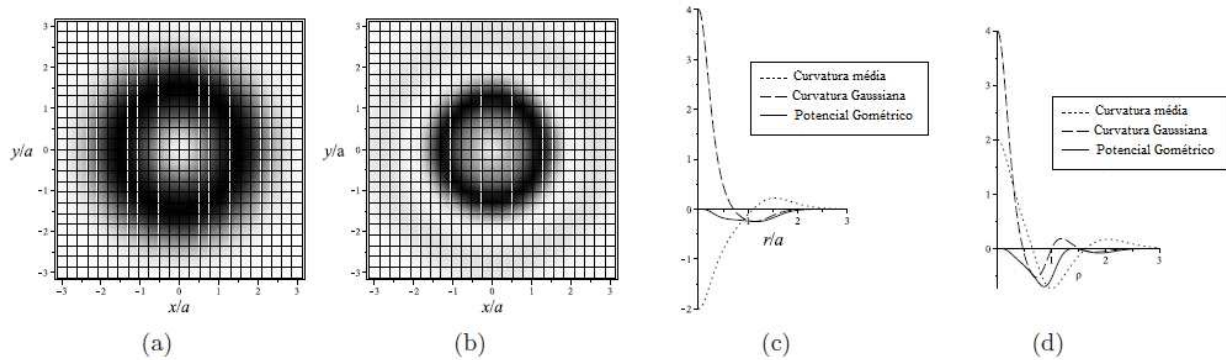


Figura 5.2: Em (a) e (b) temos a imagem de ambos os potenciais geométricos mostrando a região com maior densidade como anel. (c) e (d) são os gráficos da curvatura média, curvatura Gaussiana e o potencial geométrico das superfícies; no primeiro caso, a curvatura Gaussiana conduz à existência de um anel, enquanto que no segundo a curvatura média parece assim contribuir com para a formação do anel.

Vimos anteriormente que um anel quântico 2D no plano  $X - Y$  pode ser modelado pelo potencial

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_o, \quad (5.21)$$

onde  $V_o = 2\sqrt{a_1 a_2}$ . Este potencial tem um mínimo em  $r = r_o = (a_1/a_2)^{1/4}$ , que é o raio médio do anel. Para os elétrons em movimento  $r_o$ , o potencial tem uma forma parabólica simples, que é

$$V(r) \approx \frac{1}{2}m^*\omega_o^2(r - r_o)^2, \quad (5.22)$$

onde  $\omega_o = \sqrt{8a_2/m^*}$ . Notemos que esta aproximação harmônica pode também ser conseguida para os potenciais (5.2a) e (5.2b) respectivamente.

## 5.4 Ponto Quântico Induzido por Geometria

Nesta seção, vamos investigar os elétrons em superfícies com múltiplas deformações Gaussianas. Elas são representadas nas figuras (5.3a) e (5.4a) com funções de altura dadas por  $h(x, y) = h_o x y e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$  e  $h(x, y) = h_o(x^2 - y^2)e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$ , respectivamente.

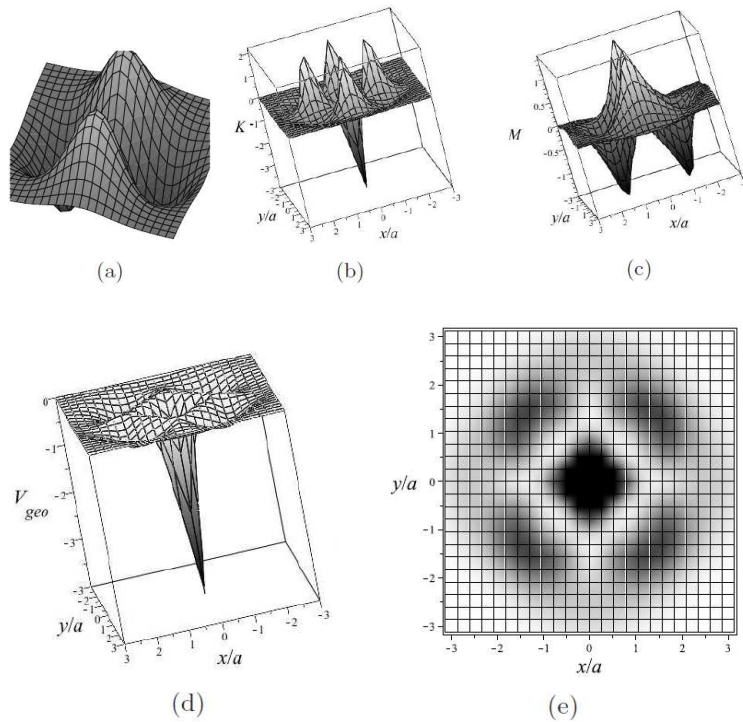


Figura 5.3: (a) Superfície de dada por  $h(x, x) = h_o(x^2 - y^2)e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$  (b) Curvatura Gaussiana (c) Curvatura Média (d) Potencial geométrico induzido (e) Parcelas da densidade do potencial geométrico induzido. Existem vários mínimos, o mais profundo está em torno da origem do sistema de coordenadas. Podemos ter aqui um ponto quântico bidimensional induzido pela geometria.

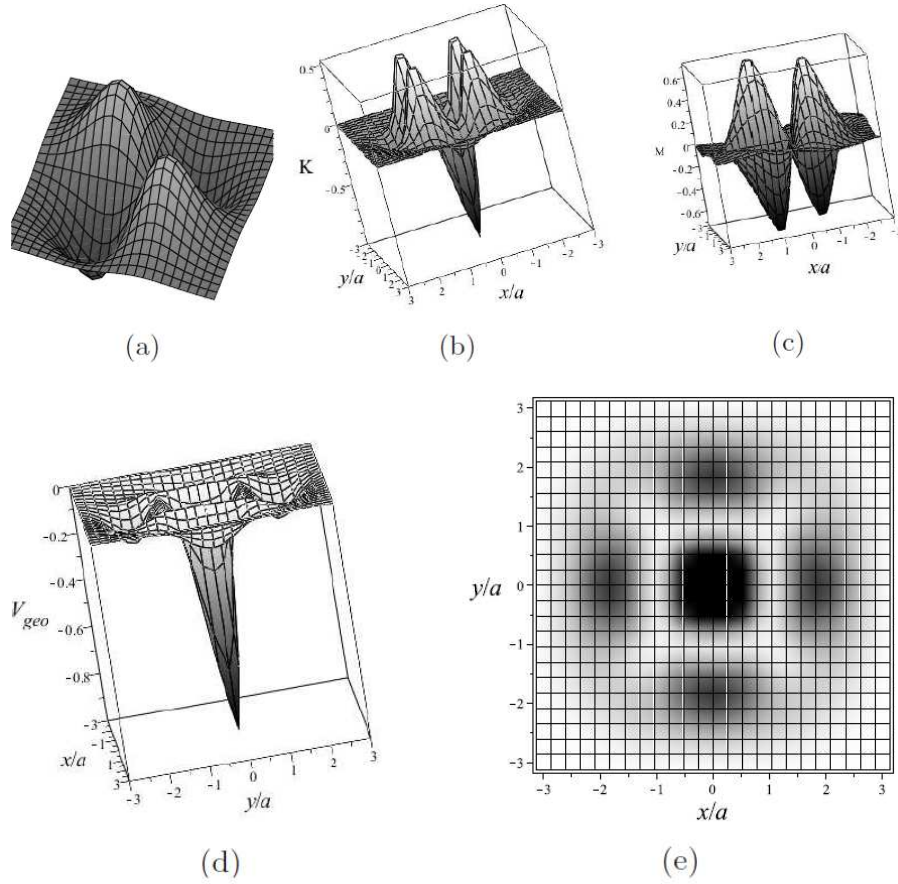


Figura 5.4: **(a)** Superfície de dada por  $h(x, y) = h_0 x y e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2a^2}}$ . **(b)** Curvatura Gaussiana **(c)** Curvatura Média **(d)** Potencial geométrico induzido **(e)** Parcelas da densidade do potencial geométrico induzido. Existem vários mínimos, o mais profundo está em torno da origem do sistema de coordenadas. Podemos ter aqui um ponto quântico bidimensional induzido pela geometria.

Usando as equações (5.8) e (5.9), podemos construir o potencial geométrico (5.2). Note que na última seção também analisamos o potencial geométrico induzido em coordenadas cartesianas para saliências individuais. Mesmo que uma análise completa deva ser realizada levando em conta a invariância rotacional das superfícies[34], sabemos das consequências físicas induzidas por essas superfícies particulares: um anel quântico induzido pela geometria. No caso de múltiplas saliências, conforme ilustrado nas figuras (5.3a) e (5.4a), não temos a invariância rotacional. Então, não podemos reduzir a equação de Schrödinger como uma equação unidimensional para cada número quântico do momento angular. Então, vamos

investigar  $V_{\text{geo}}$  uma vez que ele irá nos mostrar qual dispositivo quântico pode ser construído com essa geometria particular.

Nas figuras (5.3) e (5.4), mostramos a curvatura Gaussiana, a curvatura média e os potenciais geométricos induzidos para dois tipos de superfícies (figuras (5.3a) e (5.4a)) com várias deformações Gaussianas. Como podemos ver, ambos os potenciais têm um mínimo mais profundo em  $x = y = 0$ , com outros mínimos mais rasos em torno dele. Assim, para  $x = y \approx 0$ , podemos ter o confinamento de cargas, que se parece com o que foi definido em (5.19) para um ponto quântico bidimensional, que é dada por  $a_1 = 0$  ( $V(r) = a_2 r^2$ ). Então, dependendo do tamanho da amostra, podemos ter o surgimento de um ponto quântico induzido pela geometria se os elétrons estiverem sujeitos apenas ao potencial geométrico. Assim, pelas figuras (5.3) e (5.4) observamos que a curvatura Gaussiana é responsável pelos resultados físicos aqui discutidos, uma conclusão que é semelhante ao caso de um única saliência.

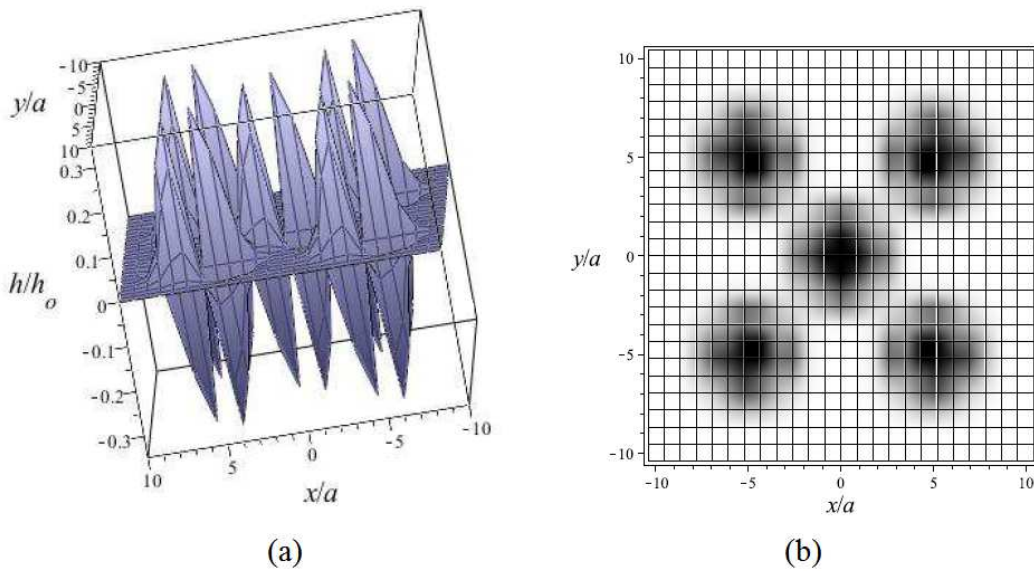


Figura 5.5: **(a)** Distribuição de múltiplas saliências. **(b)** Parcelas da densidade do potencial induzido pela geometria.

Na figura (5.5), mostramos que, se formos capazes de criar um substrato com uma

distribuição das estruturas como é ilustrada nas figuras (5.3a) e (5.4a), podemos construir uma rede de pontos quânticos induzidos pela geometria.

Investigamos os potenciais geométricos induzidos para uma classe de superfícies mostrando deformações Gaussianas. Temos utilizado o quadro de redução dimensional da abordagem de da Costa [4]. Se for apresentada uma única saliência (figuras (5.1a) e (5.1b)), que dá origem a um anel quântico induzido por geometria, uma vez que os elétrons podem se localizar em pequenos círculos em torno do centro dessas superfícies. Previsto por [34]. O raio do anel e a energia mínima são controlados por meio de parâmetros da superfície. Para superfícies com múltiplas deformações, vimos que o potencial geométrico pode prender as partículas quânticas em torno do centro dessas superfícies, dependendo do tamanho dessas estruturas, podendo originar um ponto quântico por meio da geometria induzida. Como vimos, parece que a curvatura Gaussian conduz a física abordada aqui. Isto é importante, uma vez que a mecânica quântica com base na teoria de Dirac de segunda ordem intrínseca sobre uma superfície no espaço tridimensional comum apresenta um potencial geométrico diferente, que é exclusivamente determinado pela curvatura Gaussian [39]. Assim, embora os resultados físicos sejam quantitativamente diferente daqueles que vêm da abordagem do da Costa, serão os mesmos a partir de um ponto de vista qualitativo. De fato, o potencial geométrico baseado na teoria de Dirac de segunda ordem é descrito no texto como a curvatura Gaussian para as superfícies aqui estudadas.



# Capítulo 6

## Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho foi abordado alguns aspectos sobre pontos quântico bem como surgimento, fabricação e aplicação. Ao aplicarmos a geometria diferencial em um sistema físico, tal como o que trabalhamos até então, podemos obter resultados que podem ter aplicabilidade em diversas áreas do conhecimento científico. Vimos que uma superfície deformada pode gerar um anel quântico, um fio quântico e até mesmo um ponto quântico. Para compreendermos sobre tais conceitos foi necessário o estudo sobre a teoria desenvolvida por da Costa [4], e a aplicabilidade em superfícies, como por exemplo uma superfície helicoidal [19] que podemos ver algo similar ao efeito Hall, podemos também citar a catenóide [20] que pode gerar um potencial análogo ao de um buraco de minhoca. Lembrando que tais exemplos exigem algumas considerações físicas a respeito do momento angular, como descrito no final do capítulo 4.

Desso modo, fizemos alguns estudos a cerca de determinadas superfícies com deformações gaussianas [22], que ao utilizarmos a teoria estudada, vimos que estas superfícies nos proporcionam alguns resultados interessantes. Sabemos que a curvatura gaussiana gera a física que desejamos, no entanto para alguns casos percebemos que a curvatura média pode também contribuir para os resultados obtidos. Sendo assim, no nosso trabalho tendo com enfoque pontos quânticos, percebemos que dada uma superfície orientável, como vimos no capítulo 5, podemos obter um ponto quântico ou uma rede de pontos quânticos a partir de deformações gaussianas.

A realização experimental para os nossos resultados podem ser investigadas em folhas

de bicamadas de grafeno, como discutida em [31, 20, 19]. Eles não são aplicáveis a uma monocamada grafeno, uma vez que, neste caso, a dinâmica de transporte é descrito pelo Hamiltoniano de Dirac bidimensional [32]. Mas, o grafeno é um exemplo de uma membrana eletrônica [40]. Especula-se que os resultados físicos aqui abordados vão aparecer em tal sistema, mas vamos deixar isso aberto para trabalhos futuros. Esperamos que o nosso trabalho, entre os outros interessantes aqui citados que se preocupam com fenômenos induzido pela geometria, levem a novas técnicas de construção de dispositivos quânticos.

Estudamos até então a teoria de Schrodinger para algumas superfícies. No entanto uma proposta de continuidade desse trabalho seria o estudo da teoria de Dirac, uma vez que é aplicada a monocamadas de grafeno, onde os elétrons se movimentam como férmions sem massa. Podemos também, futuramente, estudar outros fenômenos em gás de elétrons bidimensionais, tais como efeito hall, correntes persistentes, etc.

# Bibliografia

- [1] D. H. Feng, L. F. Shan , T. Q. Jia, X. Q. Pan, H. F. Tong et al, Applied Physics Lettes, **102**, 062408 (2013).
- [2] S. Pleutin, Eur. Phys. J. B **49**, 2535 (2006).
- [3] S. M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*(Livraria da Física, 2004 ).
- [4] R. C. T. da Costa, Phys. Rev. A **23**,1982 (1981).
- [5] S. Martini, J. C. Lucchi, A. E. B. Marques, T. E. Lamas, M. J. da Silva, A. A. Quivy, Integração (USJT), **44**,49 (2006).
- [6] M. A. Red, Scientific American *Quantum Dots*, 118123 (1993).
- [7] R. D. Schaller, V. M. Agranovich, V. I. Klimov, R. D. Schaller, M.A. Petruska, Nature Physycs **1**, 188194 (2005).
- [8] R. D. Schaller, V. M. Agranovich, V. I. Klimov, R. D. Schaller, M.A. Petruska, Nature Physycs **87**, 253102 (2005).
- [9] W-C Tan, J C Inkson, Semicond. Sci. Technol. **11** (1996) 1635.
- [10] M. Russo, C. Meier, B. Marquardt, A. Lorke, D. Reuter, A. D. Wieck, Taylor Francis **79**, 765-770 (206).
- [11] Y. Alhassid, Reviews of Modern Physycs, **72**, 896-948 (2000)
- [12] S. Lee, Y. Lee, E. B. Song, K. L. Wang, T. Hiramoto, Applied Physics Lettes, **102**, 083504 (2013).

- [13] M. J. Fernée, E. Thomsen, P. Jensen, H. Rubinsztein-Dunlop, *Nanotechnology*, **17**, 956-962 (2006).
- [14] H. Hassanabadi, *Eur. Phys. J. B* **74** 415-418 (2010).
- [15] M. P. do Carmo, *Differential Geometry of Curves and Surfaces*(Prentice Hall,1976 ).
- [16] P. V. Araújo, *Geometria Diferencial*(IMPA, 2008 ).
- [17] E. Kreyszing, *Differential Geometry* (Dover, 1991)
- [18] R. D. Kamien, D. R. Nelson, C. D. Santangelo, V. Vitelli, *Phys. Rev. E* **80**, 051703 (2009).
- [19] R. Dandoloff, A. Saxena, B. Jensen, *Phy. Rev. B* **79**, 033404 (2009).
- [20] R. Dandoloff, A. Saxena, B. Jensen, *Phys. Rev. A* **81** , 014102 (2010).
- [21] B. Jensen, R. Dandoloff, *Physics Letters A* **375** 448-451 (2011).
- [22] K. V. R. A. Silva, C. F. de Freitas, C. Filgueiras, *Eur. Phys. J. B* **86**, 147 (2013).
- [23] M. O. Katanaev, *Physics-Uspekhi* **48**, 675 (2005).
- [24] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B* **23**, 5632 (1981).
- [25] B. A. Bernevig, T. A. Hughes, S. C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [26] M. Bttiker, Y. Imry, R. Landauer, *Phys. Lett. A* **96**, (1983) 365.
- [27] Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [28] V. Ya. Prinz, V. A. Seleznev, A. K. Gutakovskiy, A. V. Chehovskiy, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, T. A.
- [29] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* **306**, 666-669 (2004).

- [30] C. Furtado, C. A. de Lima Ribeiro, S. Azevedo, *Phys. Lett. A* **296**, **171** (2002);  
D. V. Bulaev, V. A. Geyler, V. A. Margulis, *Physica B* **337**, 180 (2003);  
D. V. Bulaev, V. A. Margulis, *Eur. Phys. J. B* **36**, 183 (2003);  
A. Lorke, S. Böhm, W. Wegscheider, *Superlattices and Microstructures* **33**, 347 (2003);  
L. I. Magarill, A. V. Chaplik, M. V. Entin, *Physics-Uspekhi* **48**, 953 (2005);  
A. B. Vorobev, K. J. Friedland, H. Kostial, R. Hey, U. Jahn, E. Wiebicke, J. S. Yukecheva, V. Y. Prinz, *Phys. Rev. E* **75**, 205309 (2007);  
C. Filgueiras, B. F. Oliveira, *Ann. of Phys.(Berlin)* **523**, 898 (2011);  
M. J. Bueno, C. Furtado, A.M. de M. Carvalho, *Eur. Phys. B* **85**, 53 (2012);  
K. Kowalski, J. Rembieliński, *Ann. of Phys. (New York)*, 10.1016/j.aop.2012.10.003;  
A. A. de Lima, C. Filgueiras, *Eur. Phys. Jour. B* **85**, 401 (2012).
- [31] Y. N. Joglekar, A. Saxena, *Phys. Rev. B* **80**, 153405 (2009).
- [32] V. Atanasov, A. Saxena, *Phys. Rev. B* **81**, 205409 (2010).
- [33] R. D. Kamien, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 953 (2002).
- [34] V. Atanosov, R. Dandoloff, *Phys. Lett. A* **371**, 118 (2007).
- [35] M. A. Reed, *Scientific American* 118-123 *January* (1993).
- [36] *Quantum Dots - A Variety of New Applications*(collections of practical applications of quantum dots), DOI: 10.5772/2645.
- [37] N. Ogawa N, K. Fujii, A. Kobushukin, *Prog. Theor. Phys.* **83**, 894 (1990);  
N. Ogawa, K. Fujii, N. Chepliko, A. Kobushukin, *Prog. Theor. Phys.* **85**, 1189 (1991);  
M. Ikegami, Y. Nagaoka, *Prog. Theor. Phys.* **106**, 235 (1991);  
J. Gravesen, M. Willatzen and L. C. Lew Yan Voon, *Physica Scripta.* **72**, 105 (2005);  
G. Ferrari, G. Cuoghi, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 230403 (2008).

- [38] G. G. B. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press, 2005).
- [39] B. Jensen, R. Dandoloff, *Phys. Lett. A* **375**, 448 (2011).
- [40] Eun-Ah Kim, A. H. Castro Neto, *EPL* **84**, 57007 (2008).
- [41] MapleSoft. Disponível em: <http://www.maplesoft.com/applications/category.aspx?cid=1335>. Acessado em: 12 Set. 2011.