

NÍVEIS DE LANDAU NA PRESENÇA DE DEFEITO TOPOLÓGICO COM MASSA VARIANDO COM A POSIÇÃO

SOUZA, José J.C¹, MARQUES, Geusa de A.² e BEZERRA, Valdir Barbosa³

1. Introdução

O estudo de sistemas quânticos no espaço com diversas topologias tem sido abordado em diferentes áreas da física como, por exemplo, a gravitação e a física da matéria condensada. No contexto da matéria condensada a mudança na topologia em um meio material introduzida por um defeito linear tal como uma desclinação, deslocação ou despiração em um meio elástico desempenha um papel importante na determinação das propriedades físicas, químicas e estruturais de um material. Tais defeitos são classificados quanto a sua dimensão, sendo esses pontuais, lineares ou superficiais. A influência desses defeitos nas quantidades físicas de um elétron pode ser compreendida através da abordagem geométrica, onde as condições de contorno impostas pelo defeito serão incorporadas na métrica. Esta abordagem geométrica está baseada na correspondência, do ponto de vista matemático, que existe entre a teoria de defeitos em sólidos e a teoria da gravitação. Uma maneira de representar geometricamente a formação de defeitos lineares através do chamado processo de Volterra. Este procedimento consiste de um mecanismo de 'corte' e 'cola' em que, para gerar o defeito, podem ocorrer uma ou mais das seguintes etapas: inserção ou retirada de material do meio, deslocamentos ou encurvamentos do material. Neste trabalho estudamos a influência da topologia no estudo dos níveis de Landau na

presença de defeitos topológicos em física da matéria condensada.

Analisaremos a influência da topologia na dinâmica quântica de uma partícula carregada com massa dependendo da posição [$m^* = M(1 + \mu\lambda\rho^2)$] em um campo magnético uniforme na direção do eixo z na presença de uma desclinação no âmbito da teoria de defeitos em sólidos de Katanaev-Volovich. Sistemas com massa efetiva variando com posição são bem estudados na literatura para explicar fenômenos físicos em micro-estruturas (KITTEL, 1968). A importância do estudo desse problema é que em um meio material com uma distribuição contínua de defeitos torna-se uma configuração mais realista, pois, um dado material, geralmente, poderá exibir mais de um defeito. Aplicações especiais em matéria condensada são feitas na investigação de propriedades eletrônicas de semicondutores, heteroestruturas de semicondutores, etc. O aparecimento de desclinações em outros sistemas de matéria condensada, como é o caso de cristais líquidos, para os quais podem ter um laboratório para simular fenômenos em Cosmologia. Eis alguns exemplos que podemos citar: da passagem da luz próximo a corpos massivos ou estudo de cordas cósmicas via modelagem por sistemas de cristais líquidos (SÁTIRO, 2006).

-
1. Primeiro Autor é Aluno de Mestrado da Unidade Acadêmica de Física, Universidade Federal de Campina Grande. Av. Aprígio Veloso, 882, Bloco CY, Sala 103, Campina Grande, PB, CEP: 58.109-970. E-mail: jsouza@df.ufcg.edu.br
 2. Segundo Autor é Professora Adjunta da Unidade Acadêmica de Física, Universidade Federal de Campina Grande. Av. Aprígio Veloso, 882, Bloco CY, Sala 103, Campina Grande, PB, CEP: 58.109-970. E-mail: gmarques@df.ufcg.edu.br
 3. Terceiro Autor é Professor Adjunto do Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba. Av. Cidade Universitária, Sala 07, João Pessoa, PB, CEP: 58.059-900. E-mail: valdir@fisica.ufpb.br
- Apoio Financeiro: CAPES

2. Material e métodos

A. Desclinação

São defeitos associados à simetria de rotação. As simetrias dos cristais impõem restrições às desclinações, pois as estruturas cristalinas têm um número de rotações finitas. Mas em sólidos amorfos são de grande importância e existem em grande quantidade devido à falta de ordem de longo alcance (ZALLEN, 1983). No caso das desclinações ocorre a retirada ou inserção de material extra no meio. Quando é retirada uma fatia do material, temos desclinações positivas; quando é adicionado material, temos desclinações negativas. Na figura 1 é representada a visualização do processo de Volterra para geração de uma desclinação do tipo cunha, que é um exemplo de desclinação positiva. Inicialmente temos um plano, do qual é retirada uma fatia de ângulo diedral λ e em seguida as extremidades são identificadas, gerando um cone. No caso da desclinação negativa o ângulo inserido é chamado de ângulo de acréscimo. Ver figura 2.

Podemos associar o ângulo diedral λ ao vetor axial $\vec{\lambda}$, que está orientado ao longo do eixo z para o caso da desclinação em cunha. Este vetor axial é o chamado vetor de Frank (KATANAEV, 1992). Alguns tipos núcleos de desclinações estão representados na figura 3 e 4. Observamos que a direção de giro do vetor de Frank, na etapa de identificação dos planos que formam um ângulo λ entre si, é diferente em cada um dos tipos de desclinações.

O vetor de Frank e o tensor de curvatura são relacionados através de

$$\lambda^{ij} = \int \int_S dx^\mu \Lambda dx^\nu R_{\mu\nu}^{ij} \quad (1)$$

A partir da expressão (1) vemos que o tensor de curvatura representa fisicamente a densidade superficial do vetor de Frank. Assim, a presença de desclinações em um meio está associada ao fato de o espaço em questão ser curvo.

Do ponto de vista da matéria condensada um defeito pode ser originado de diversas

maneiras, seja por uma alteração numa região de uma amostra causada por uma modificação na rede cristalina, seja pela adição de átomos estranhos como quando uma amostra passa por um processo de dopagem, por exemplo.

B. Níveis de Landau na presença de uma desclinação com massa variando na posição

Na mecânica quântica, as órbitas de elétrons se tornam quantificáveis e exibem níveis discretos de energia. Estes níveis são chamados de níveis de Landau e correspondem a energias onde interferências ocorrem em uma função quântica de onda de elétrons orbitando. Os Níveis de Landau têm sido bastante estudados nos últimos anos com o surgimento do efeito Hall quântico (PRANGE, 1987). O estudo de elétrons e buracos submetidos a campos magnéticos é de grande importância para a compreensão deste efeito.

Investigaremos a influência da topologia nos níveis de Landau na presença de um defeito topológico na física da matéria condensada chamado desclinação sobre o espectro de energia de partículas carregadas (elétrons ou buracos) na presença de um campo magnético paralelo à linha de desclinação com massa variando com a posição cujo comportamento é dado por

$$m^* = M (1 + \mu\lambda\rho^2) \quad (2)$$

Onde, μ corresponde a um parâmetro real escalar, λ comprimento de onda de de Broglie e ρ coordenada radial planar (em coordenadas cilíndricas). E da sua influência sobre as degenerescências nos níveis de energia, pois conforme (LANDAU, 1991) a introdução apenas da curvatura não resolve o problema da degenerescência infinita dos níveis de Landau.

O procedimento que adotamos para determinar os níveis de Landau em um meio com defeitos é o seguinte: Os defeitos são descritos por uma métrica que contém toda informação sobre a deformação causada no meio por este e em cada caso a métrica é solução das equações de campo tridimensional.

3. Discussão e Resultados

O operador Hamiltoniano correspondente a uma partícula carregada na presença de um potencial vetor no espaço cuja geometria é descrita pelo tensor métrico g_{ij} é dado por

$$H = \frac{1}{2m^*\sqrt{g}} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left[\sqrt{g} g^{ij} \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \right] \quad (3)$$

Onde usamos o acoplamento mínimo do momento linear e o potencial vetor, $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$.

A métrica que descreve um meio com desclinação, em coordenadas cilíndricas, é da forma (KATANAIEV, 1992)

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j = dz^2 + d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\phi^2 \quad (4)$$

Esta métrica é equivalente à de Minkowski, porém, com condição de contorno com periodicidade de $2\pi\alpha$ ao invés de 2π em torno do eixo z . Semelhante a seção transversal da métrica de uma corda cósmica (VILENKIN, 1985). A diferença está na variação do α . No processo de criação da desclinação esta periodicidade corresponde a remover uma cunha de material, quando $\alpha < 1$, temos uma desclinação positiva e a inserção de material quando $\alpha > 1$ correspondendo a uma desclinação negativa. O ângulo diedral λ e o parâmetro α na métrica acima se relacionam via expressão $\lambda = 2\pi(\alpha - 1)$ (MARQUES, 2001). Esta métrica localmente plana, mas globalmente o espaço é curvo devido à singularidade no tensor de Ricci dado por

$$R_{12}^{12} = R_1^2 = R_2^2 = 2\pi \frac{1-\alpha}{\alpha} \delta_2(\rho) \quad (5)$$

Onde, $\delta_2(\rho)$, é a função delta em duas dimensões. Da expressão acima, segue que se $0 < \alpha < 1$ ($-2\pi < \lambda < 0$) o defeito tem curvatura positiva e se $0 < \alpha < \infty$ ($0 < \lambda < \infty$) o defeito tem curvatura negativa. A presença de defeitos provoca a quebra da propriedade simétrica da periodicidade e introduz fontes de espalhamento (KITTEL, 1968).

Para determinar os níveis de Landau vamos considerar a equação de Schrödinger escrita no espaço dotado desta métrica incorpora as condições de contorno estabelecidas pelo defeito

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (6)$$

Onde, $\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i (g^{ij} \sqrt{g}) \partial_j$, corresponde ao operador de Laplace-Beltrami. Como sabemos existe um infinito número de potenciais vetor \vec{A} que pode ser usado para representar um campo magnético uniforme da direção z . A configuração do potencial vetor que nos dá um campo magnético uniforme em um espaço cônico é

$$A(\rho) = \frac{B\rho}{2\alpha} \hat{e}_\phi \quad (7)$$

Usando o acoplamento mínimo onde $p_i \rightarrow p_i - \frac{e}{c} \vec{A}$, obtemos o Hamiltoniano para uma partícula na presença de uma desclinação submetido a um campo magnético uniforme orientado na direção z como sendo,

$$H = -\frac{\hbar}{2m^*} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \quad (8)$$

$$+ \frac{i\hbar e B}{2m^* \alpha^2 c} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e^2 B^2}{8m^* c^2 \alpha^2}$$

No limite em que $\alpha \rightarrow 1$, a expressão acima corresponderia ao Hamiltoniano de Landau no espaço euclidiano em coordenadas cilíndricas. Observe que (8) pode ser escrito em termos da massa efetiva (2), daí teremos

$$H = \frac{\hbar}{2M(1 + \mu\lambda\rho^2)} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$+ \frac{i\hbar e B}{M(1 + \mu\lambda\rho^2) \alpha^2 c} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{e^2 B^2}{8M(1 + \mu\lambda\rho^2) c^2 \alpha^2} \quad (9)$$

A solução para equação de Schrödinger correspondente ao Hamiltoniano (9) pode ser dada por,

$$\psi(z, \rho, \phi) = R(\rho)Z(z)\Phi(\phi) \quad (10)$$

Já que não temos nenhuma dependência explícita de z e ϕ podemos propor as soluções para z e ϕ da seguinte forma:

$$Z(z) = e^{ikz} \quad e \quad \Phi(\phi) = e^{i\ell\phi} \quad (11)$$

Agora utilizando equação de Schrödinger independente do tempo ou equação de autovalor dada por

$$H\psi = E\psi \quad (12)$$

E substituindo (9) e (10) em (12), organizando os termos, obtemos

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{2M(1 + \mu\lambda\rho^2)E}{\hbar^2} - \frac{\ell^2}{\alpha^2\rho^2} - k_z^2 - \frac{e^2 B^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2 \alpha^2} + \frac{eB\ell}{\hbar\alpha^2 c} \right] R(\rho) \quad (13)$$

Para obtermos a solução de (13) analisemos o comportamento assintótico desta equação no qual nos fornece os seguintes resultados:

I) Para $\rho \rightarrow 0$, temos:

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{\ell^2}{\alpha^2\rho^2} R(\rho) = 0 \quad (14)$$

Vamos fazer um *ansatz* com $R(\rho) = \rho^\gamma$, onde γ é uma constante. Obtemos:

$$R(\rho) \rightarrow \rho^{\frac{|\ell|}{\alpha}} \quad (15)$$

II) Para $\rho \rightarrow \infty$, teremos:

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} - \left[\frac{e^2 B^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2 \alpha^2} - \frac{2M\mu\lambda\rho^2 E}{\hbar^2} \right] R(\rho) = 0 \quad (16)$$

Daí, fazendo algumas mudanças de variáveis e resolvendo as equações diferenciais, obtemos em termos da coordenada (ρ)

$$R(\rho) \rightarrow C \exp \left[\frac{-T\rho}{2\alpha} \right] \quad (17)$$

Agora conectando as duas equações assintóticas através de uma função $F(\rho)$, teremos

$$R(\rho) \rightarrow C \exp \left[\frac{-T\rho}{2\alpha} \right] \rho^{\frac{|\ell|}{\alpha}} F(\rho) \quad (18)$$

Onde, $F(\rho)$ é uma função que faz a interpolação entre as soluções assintóticas.

$\frac{T}{\alpha} = \left(\frac{e^2 B^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2 \alpha^2} - \frac{2M\mu\lambda\rho^2 E}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ e C é uma constante de normalização.

Substituindo (18) em (13), encontramos a seguinte equação para $F(\rho)$

$$\rho \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{2|\ell|}{\alpha} - \frac{2T\rho^2}{\alpha} + 1 \right] \frac{dF(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{eB\ell}{\hbar c \alpha^2} - k_z^2 - \frac{2T}{\alpha} - \frac{2|\ell|T}{\alpha^2} \right] \rho F(\rho) = 0 \quad (19)$$

Definindo,

$$\mathcal{A} \equiv \frac{2|\ell|}{\alpha} + 1 \quad e \quad C \equiv \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{eB\ell}{\hbar c \alpha^2} - k_z^2 \quad (20)$$

Assim, (19) pode ser escrito como

$$\rho \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} + \left[\mathcal{A} - \frac{2T\rho^2}{\alpha} \right] \frac{dF(\rho)}{d\rho} + \left[C - \frac{2T}{\alpha} - \frac{2|\ell|T}{\alpha^2} \right] \rho F(\rho) = 0 \quad (21)$$

Introduzindo novas coordenadas tal que, $T\rho^2 = r$ e $r = \alpha x$, obtemos

$$x \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + \left(\frac{\mathcal{A}}{2} - x \right) \frac{dF(x)}{dx} - \left[-\frac{C\alpha}{4T} + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha} \right] F(x) = 0 \quad (22)$$

A equação (22) representa uma equação diferencial hipergeométrica confluyente (OLIVEIRA, 2005), cuja solução é dada por

$$F(x) = {}_1F_1\left(-\frac{c\alpha}{4T} + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha}; \frac{\mathcal{A}}{2}; x\right) \quad (23)$$

Em termos de ρ , temos

$$F(\rho) = {}_1F_1\left(-\frac{c\alpha}{4T} + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha}; \frac{|\ell|}{\alpha} + \frac{1}{2}; \left(\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2 \alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \quad (24)$$

A equação acima diverge a menos que,

$$-\frac{c\alpha}{4T} + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha} = -n \quad (25)$$

Onde, ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Substituindo (20) em (25), obtemos

$$\frac{4M^2 E}{\hbar^4} + \left(\frac{4ME}{\hbar^2} a + b\right) E + a^2 - d = 0 \quad (26)$$

Onde, definimos os seguintes termos:

$$a \equiv \left(\frac{eB\ell}{\hbar\alpha^2 c} - k_z^2\right) \quad ; \quad b \equiv \frac{32M\mu\lambda\tilde{n}^2}{\hbar^2} \quad (27)$$

E

$$\tilde{n} \equiv n + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha} \quad (28)$$

A solução consistente será dada por,

$$E = -\frac{1}{8} \left(\frac{4Ma + \hbar^2 b + \sqrt{8aM\hbar^2 b + \hbar^4 b^2 + 16M^2 d}}{M^2}\right) \hbar^2 \quad (29)$$

Finalmente, substituindo os termos de (27) e (28) em (29), obtemos o seguinte resultado para o espectro de energia

$$E = \frac{\hbar\omega_H}{2\alpha} \left[2n + \frac{|\ell|}{\alpha} - \frac{\ell}{\alpha} + 1\right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \frac{4\hbar^2 \mu\lambda}{M} \times \left(n + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha}\right)^2 + \frac{2\hbar^2}{M^2} \times \quad (30)$$

$$\left(\frac{\mu\lambda eB\ell}{\hbar\alpha^2 c} - k^2 \mu\lambda\right)^{1/2} \times \left(n + \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2\alpha}\right)$$

Fazendo $\mu = 0$, teremos:

$$E = \frac{\hbar\omega_H}{2\alpha} \left[2n + \frac{|\ell|}{\alpha} - \frac{\ell}{\alpha} + 1\right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad (31)$$

4. Conclusões

Fazendo um teste de consistência, no limite $\alpha \rightarrow 1$ (ausência de defeito) na equação (31), teremos os resultados já obtidos para os níveis de Landau. Para cada valor de n ($n = 0, 1, 2, \dots$) temos infinitos valores de ℓ ($\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Assim, temos para cada nível de energia uma degenerescência infinita. Note que o efeito de substituir um elétron por um buraco, $e \rightarrow -e$, é equivalente a inverter o sinal da componente z do momento angular $\ell \rightarrow -\ell$. Observamos que $\frac{1}{\alpha}$ não é necessariamente um número inteiro, o que nos diz que a conicidade introduzida pelo defeito quebra a degenerescência infinita dos níveis de Landau. Podemos notar que dependendo como a massa está distribuída e o tipo de defeito atribuído, a degenerescência é quebrada de maneiras diferentes.

Palavras - Chave: Defeito Topológico, Mecânica Quântica, Níveis de Landau.

5. Referências

- KATANAIEV, M. O; VOLOVICH, I.V. **Theory of Defects in Solids and Three-Dimensional Gravity**. Annals of Physics 216, p.1, 1992.
- KITTEL. C. **Introduction to Solid State Physics**. 3. ed. New York: JohnWiley and Sons, 1968.
- LANDAU, L.D; LIFSHITZ, E.M. **Quantum Mechanics**. 3ed. Oxford: Pergamon Press, 1991.
- MARQUES, Geusa de A; FURTADO, C; BEZERRA, V.B; MORAES, F. **Landau levels in the presence of topological defects**. Journal of Physics A: Mathematical and General 34, p.5945, 2001.
- OLIVEIRA, E.Capelas de. **Funções Especiais com Aplicações**. 1.ed. São Paulo: Livraria da Física, 2005.
- PRANGE, R; GIRVIN, R. **The Quantum Hall Effect**. New York: Springer-Verlag, 1987.
- SÁTIRO, C; MORAES, F. **Lensing effects in a nematic liquid crystal with topological defects**, arXiv:cond-mat/0503482 v.2, 18 May 2006.
- VILENKIN, A. **Cosmic Strings and Domain Walls**. Phys.Rep.121 (1985) 263.
- ZALLEN, R. **The Physics of Amorphous Solids**. New York: John Wiley e Sons, 1983.

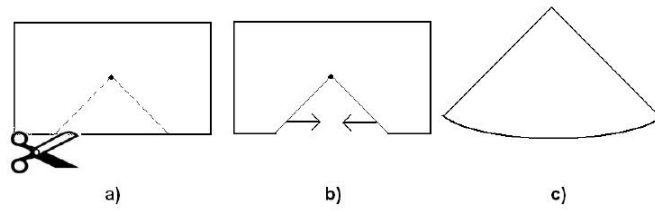


Figura 1: Etapas da geração de uma desclinação positiva através do processo de Volterra.

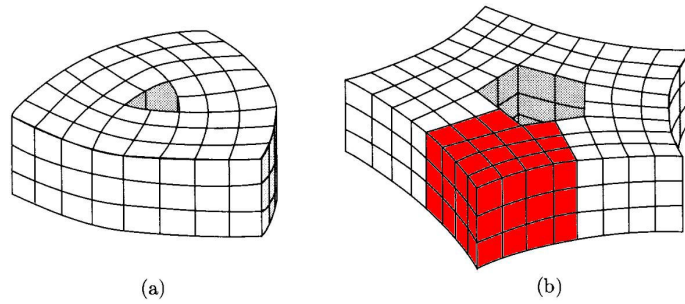


Figura 2: (a) Criação de uma desclinação positiva. Retiramos um ângulo de 90° . (b) Desclinação negativa em uma rede quadrada. Inserimos um ângulo de 90° .

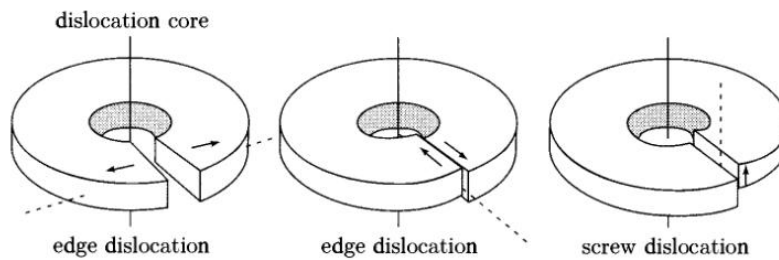


Figura 3: Processo de Volterra a declinação tipo borda e hélice.

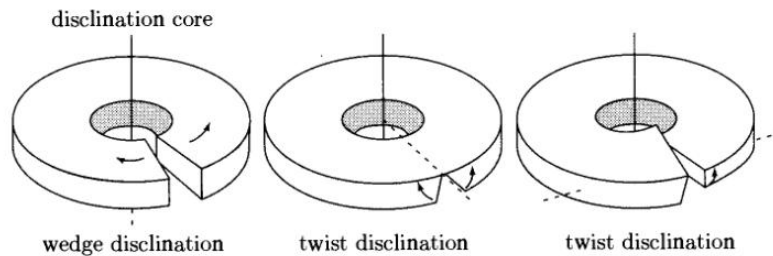


Figura 4: Processo de Volterra a declinação tipo cunha e hélice.