

Anderson Luiz de Jesus

MAPEAMENTOS UTILIZANDO SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Volta Redonda 2019

Anderson Luiz de Jesus

MAPEAMENTOS UTILIZANDO SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt

Volta Redonda 2019

Ficha catalográfica automática - SDC/BIF Gerada com informações fornecidas pelo autor

J58m Jesus, Anderson Luiz de Mapeamentos utilizando sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição / Anderson Luiz de Jesus ; Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt, orientador. Niterói, 2019. 153 f. : il. Tese (doutorado)-Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2019. DOI: http://dx.doi.org/10.22409/PPGF.2019.d.09471858798 1. SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO. 2. HAMILTONIANO DE VON ROOS. 3. MONOPOLOS MAGNÉTICOS. 4. ESPAÇO CÔNICO. 5. Produção intelectual. I. Schmidt, Alexandre Grezzi de Miranda, orientador. II. Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física. III. Título. CDD -

Bibliotecário responsável: Mario Henrique de Oliveira Castro - CRB7/6155

"One would be surprised if Nature had made no use of it".

P.A.M. Dirac

 $Esta\ tese\ \acute{e}\ dedicada\ \grave{a}\ minha\ esposa\ Alessandra\ M\acute{a}ris\ D'Oliveira\ de\ Jesus.$

Agradecimentos

Agradeço à minha amada esposa Alessandra Máris D'Oliveira de Jesus pelo apoio durante todos estes anos, pelo encorajamento nos momentos difíceis, pela compreensão e paciência nas incontáveis horas que dediquei a este trabalho, debruçado dia e noite sobre pilhas de cálculo ou diante do computador. A você dedico este trabalho, você é o motivo da minha luta. Te amo.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Alexandre G. de Miranda Schmidt pela orientação, para que este trabalho se tornasse possível, pela paciência, pela confiança depositada, pelas maravilhosas aulas nas disciplinas do curso, pelos conselhos, pelas agradáveis conversas durante o café e almoço, pelas recomendações ao ICTP e pela estimada amizade.

Ao amigo e companheiro de curso Marcello H. M. Passos pelas animadas conversas durante o café, por compartilhar momentos difíceis durante as disciplinas do curso, pela lembrança trazida do ICTP e pela amizade.

Ao amigo e companheiro de curso Alan C. Maioli pelos momentos de descontração durante café, pelo companheirismo durante as disciplinas do curso, pela fundamental ajuda com o Mathematica e pela amizade.

A minha irmã Tatiana e ao meu cunhado Rafael pelo apoio durante toda minha vida acadêmica, pela amizade, pela torcida positiva e pelos momentos de descontração. Agradeço também ao meu motogrupo "Famintos da estrada MG." pelos passeios em alguns nos finais de semana.

Ao Prof. Robson Macedo por sua constante torcida positiva, pela amizade de longa data e pelo apoio desde os primórdios da minha formação.

Ao Prof. Dr. Adriano de Souza Martins pelo apoio desde o início da minha vida acadêmica, pelo incentivo, pelas agradáveis conversas durante o café, pelas recomendações ao ICTP e pela estimada amizade.

Ao Prof. Dr. Carlos E. Fellows pelas animadas conversas durante o café, pelos conselhos, pelo apoio em diversas situações e pela amizade.

Ao Prof. Dr. Marcos Veríssimo Alves pela estimada amizade, pelas agradáveis conversas durante o café, pelos valiosos conselhos, pelas recomendações ao ICTP e pela fundamental ajuda com o exame de qualificação.

Ao Prof. Dr. Rodrigo Amorim pelas conversas animadas durante o café, pela fundamental ajuda no meu exame de qualificação e pela amizade.

Ao Prof. Dr. Thadeu Penna pelas "romarias" até o icônico bar do Julião, pelas conversas animadas e pela amizade.

Ao Prof. Dr. José Oliveira Huguenin pelo apoio e pela torcida positiva, desde os primórdios da minha trajetória no ICEx-UFF.

Ao Prof. Dr. Adriano Caminha pela amizade e pelos passeios de moto em alguns finais de semana, compartilhando a paixão chamada Harley-Davidson.

Ao Prof. Dr. Ladário Silva pelo comprometimento com as atividades do instituto, pela amizade e pelo apoio em diversas oportunidades.

Agradeço ao Prof. Dr. Licínio Portugal pela força e pela torcida positiva desde o início da minha vida acadêmica no ICEx, pelas agradáveis conversas durante o café e pela amizade.

Agradeço ao Prof. Dr. Luiz Telmo pela força desde o início da minha trajetória acadêmica no ICEx e pela amizade.

Agradeço ao Prof. Dr. Armando F. Rodrigues pelo apoio desde o início da minha vida acadêmica no ICEx-UFF, pelas valiosas dicas e pela amizade.

Agradeço ao ex-colega de curso, o Prof. Dr. Wagner F. Balthazar, pela amizade, pela torcida positiva e por ter iniciado comigo a nossa longa e difícil trajetória no ICEx-UFF, onde tivemos o privilégio de estarmos entre os três que inauguraram e iniciaram, com o apoio deste instituto, a primeira turma estendida de pós-graduação em Física do IF/UFF de Niterói.

Agradeço ao Prof. Dr. José Abdalla Helayël-Neto, do CBPF, pela amizade, pelo incentivo, pela torcida positiva, pelas recomendações para o ICTP e por sempre estar disposto a ajudar, mesmo distante.

Agradeço ao Prof. Dr. Rogério Menezes pelo apoio desde o início da minha vida acadêmica na UFF, pelos conselhos e pela amizade.

Agradeço à Prof. Dr.^a Vera Caminha pela força, pela torcida positiva e pela amizade.

Agradeço ao ex-colega de curso Jaime Souza pela torcida positiva e pela amizade.

Agradeço ao Prof. Dr. Fábio de Jesus, da escola de Eng. da UFF/PUVR pelas agradáveis conversas durante alguns encontros, pela torcida positiva e pela amizade.

Agradeço ao Prof. Dr. Eduardo Pilad, da UERJ, pela minha recomendação ao ICTP, pela fundamental ajuda com e exame de qualificação e pela amizade.

Agradeço aos alunos do nosso grupo de pesquisa, principalmente ao Matheus E. Pereira, pela presença e pela força dada nas prévias da minha defesa.

Agradeço aos professores e aos funcionários do IF/ICEx-UFF, especialmente àqueles com os quais tive mais contato durante o meu curso.

Agradeço à minha diretora Prof. Francisnéia C. de Carvalho, pela força desde o meu ingresso no curso, pela compreensão das dificuldades que é conciliar trabalho com um curso de Doutorado, pela torcida positiva e pela amizade. Também agradeço aos meus colegas de trabalho da rede CEJA/CECIERJ e da rede regular pela torcida positiva e pelo incentivo durante a minha formação acadêmica.

Por fim, agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro.

Sumário

Introdução 1 1 2 O Hamiltonian de von Roos e o problema do ordenamento 10 2.1Hamiltonianos para sistemas com massa efetiva dependente 102.2Hamiltoniano de von Roos 152.3Critério de Dutra e Almeida 202.4Conclusão 223 Mapeamento entre o sistema carga-monopolo e sistemas com $\mathbf{23}$ massa efetiva dependente da posição Formulação do problema carga-monopolo em sistemas quânticos 3.124Equação angular 283.1.13.1.2Equação radial 293.231Mapeamento exato 3.3353.3.1Equação diferencial parcial não-linear para a massa . . 38 3.3.2Soluções numéricas 40 3.4Conclusão 51

4	Mapeamento entre o sistema carga-dyon e sistemas com massa				
	efet	iva dependente da posição	52		
	4.1	Introdução	53		
	4.2	Mapeamento exato	54		
		4.2.1 Equação diferencial parcial para a massa	56		
		4.2.2 Soluções numéricas	59		
	4.3	Sistema carga-dyon relativístico - mapeamento exato via equação			
		de Klein-Gordon	61		
		4.3.1 Monopolo de Wu-Yang abeliano	65		
	4.4	Conclusão	68		
5 Mapeamento entre o sistema carga-monopolo		peamento entre o sistema carga-monopolo e sistemas com			
	mas	sa efetiva dependente da posição via equação de Pauli	70		
	5.1	Introdução	71		
	5.2	2 Equação de Pauli com massa efetiva dependente de posição -			
		caso livre	73		
	5.3	3 Mapeamento exato do sistema carga-monopolo em um sistema			
		quântico PDM via equação livre de Pauli	74		
		5.3.1 Mapeamento exato para o caso $j = \mu - 1/2$	76		
	5.4	Conclusão	79		
6	Maj	peamento entre o sistema carga-dyon e sistemas com mass	a		
	efet	iva dependente da posição via equação de Pauli	85		
	6.1	Introdução	85		
	6.2	Mapeamento exato do sistema carga-dyon em um sistema quântico			
		PDM via equação livre de Pauli	87		
		6.2.1 Mapeamento exato para o caso $j = \mu - 1/2$	88		
	6.3	Conclusão	91		

7	Maj	peamento entre o espaço cônico e sistemas com massa		
efetiva dependente da posição				
	7.1	Introdução	96	
	7.2 Partícula neutra no espaço cônico			
	7.3 Mapeamento exato de uma partícula neutra vinculada a um			
		espaço cônico em um sistema quântico PDM	100	
		7.3.1 Equação diferencial para o mapeamento exato 1	102	
		7.3.2 Soluções numéricas	103	
	7.4	Aproximação para pequenos valores de ρ	104	
	7.5	Conclusão	107	
8	Conclusões e Perspectivas Futuras		.09	
	8.1	Conclusões	109	
	8.2	Perspectivas Futuras	114	
\mathbf{A}	A Potencial vetor para o monopolo de Dirac 11		15	
в	Solução exata para o sistema quântico carga-monopolo 119		19	
\mathbf{C}	C Aproximação de massa efetiva 12:			

Lista de Figuras

3.1	Ilustração do mapeamento aproximado entre as funções de	
	onda radiais de um sistema carga-monopolo com massa cons-	
	tante e carga PDM sem monopolo. Aqui apresentamos G_{11}	
	(amarelo) e H_{11} (azul) e observamos que a aproximação é boa	
	para $0 < r < 5$	6
3.2	Curva do potencial efetivo associado ao valor $w(1,1)$. Usamos	
	$\mu = 1/2 \ (n = 1)$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1. \ldots 3$	7
3.3	Soluções numéricas da equação angular (3.57). As condições	
	de contorno são $M(0) = M(\pi) = 1$ e foram apresentadas	
	quatro curvas para diferentes autovalores de energia. Usamos	
	$r_0 = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 14$	3
3.4	Curvas do potencial efetivo determinadas a partir das soluções	
	numéricas da equação angular (3.57), onde as condições de	
	contorno são $M(0) = M(\pi) = 1$. Observe que há duas assíntotas	
	verticais em $\theta = 0$ e $\theta = \pi$. Usamos $\mu = l = 1, r_0 = 1$ e uni-	
	dades onde $\hbar = m_e = c = 1.$	4
3.5	Soluções numéricas da equação angular (3.57) usando as condições	
	iniciais $M(0) = 1$ e $M'(0) = 0$. Usamos $\mu = l = 1$, $r_0 = 1$ e	
	unidades onde $\hbar = m_e = c = 1.$	4

- 3.8 Potenciais efetivos calculados usando a solução mostrada na Fig. 3.7 com $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $\theta_0 = \pi/4$, $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

47

- 3.9 Soluções numéricas da equação (3.58) para alguns autovalores crescentes de energia. As condições de contorno são M(r)usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Aqui fixamos o valor $\theta_0 = \pi/4$. Tão perto quanto se aproxima da origem - onde o monopolo está localizado - a solução diverge. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1, \ldots ...$ 48
- 3.10 Potenciais efetivos calculados usando a solução mostrada na Fig. 3.9 com $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Aqui fixamos o valor $\theta_0 = \pi/4$. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1, \dots, \dots, \dots, \dots, \dots, \dots$ 48

- 3.11 Soluções numéricas da equação (3.58) para diversos valores de θ_0 variando de 40° a 100°. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Usamos $E = \mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$ 49
- 3.13 Solução numérica da equação (3.58) utilizando agora um tronco de cone, onde o valor para a massa efetiva é dado pela escala de cores. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Tão perto quanto se aproxima da origem - onde o monopolo está localizado - a solução diverge. Usamos $\mu = -m = l = 1, \theta_0 = \pi/4,$ E = 0,20 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1. \dots \dots ...$ 50

- 4.4 Superfície representando a solução analítica (4.22) para $\mu = 1$, $l = 0 \ N = 1 e \ eQ = -1$ nos intervalos $0.2 < r < 1.0 e \ 0 < \theta < \pi$. Foram utilizadas as unidades naturais, onde $\hbar = m_0 = c = 1$. 64
- 5.1 Soluções radiais do sistema (5.15). As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Aqui fixamos $\theta_0 = \pi/6$. note que ambas as soluções estão praticamente sobrepostas. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5, j = m = 9/2, E = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$. 80

- 5.3 Soluções radiais do sistema (5.15) para determinados autovalores de energia. As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Aqui fixamos $\theta_0 = \pi/6$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5$, j = m = 9/2 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$
- 5.4 Soluções radiais do sistema (5.15) para alguns valores do ângulo θ_0 . As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1 \text{ e } M'(r_i) =$ 0 para $r_i = 0.20$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5, j = m = 9/2, E = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$. 83

82

- 6.1 soluções numéricas do sistema (6.9), a carga elétrica do dyon Q foi fixada em $-1800\sqrt{\alpha}$. As condições iniciais são M(r)usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Fixamos $\theta_0 = \pi/6$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o dyon está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 7$, j = m = 13/2, N = 0 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$ 92

- 7.1 Planificação do cone com ângulo deficitário D e raio a = 1. . . 99

Resumo

O principal objetivo desta tese é construir sistemas quânticos análogos aos sistemas compostos por carga-monopolo, carga-dyon e por uma partícula neutra vinculada ao espaço cônico, utilizando sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição (sistemas quânticos PDM) na parametrização de Zhu-Kroemer. No sistema carga-monopolo investigamos os mapeamentos aproximado e exato: o primeiro é obtido formulando o problema carga-monopolo em um cenário PDM, o segundo é obtido substituindo a autofunção exata deste sistema na equação de Schrödinger livre PDM, obtendo uma EDP para a distribuição de massa. No sistema carga-dyon estudamos somente o mapeamento exato e no caso relativístico, estudamos o mapeamento via equação de Klein-Gordon PDM, obtendo uma solução analítica. Investigamos o mapeamento exato dos sistemas carga-monopolo e carga-dyon via equação de Pauli livre PDM, considerando valores específicos de μ e *m* satisfazendo uma dada condição. Este último mapeamento foi construído para o caso $j = \mu - 1/2$. Por fim realizamos o mapeamento exato de uma partícula quântica escalar e neutra, restrita a mover-se em uma superfície cônica. De um modo geral as equações de mapeamento exato no regime não-relativístico são não-lineares e resolvemo-las numericamente para a distribuição de massa M. As soluções foram apresentadas graficamente e a partir delas foram determinados os respectivos potenciais efetivos, os quais representam nossos modelos análogos.

Palavras-chave: Sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição, Hamiltoniano de von Roos, monopolos magnéticos, espaço cônico.

Abstract

The main objective of this thesis is to build quantum systems analogous to the systems composed of charge-monopole, charge-dyon and of a neutral particle bounded in a conical space, using position-dependent effective mass background (PDM quantum systems) in the Zhu-Kroemer parameterization. In the charge-monopole system we investigate the approximate and exact mapping: the former is obtained by formulating the charge-monopole problem in a PDM background, the latter is obtained by replacing the exact eigenfunction of this system in the free PDM Schrödinger equation to obtain an EDP for the mass distribution. In the charge-dyon system we study only the exact mapping and in the relativistic case, we study the mapping via the PDM Klein-Gordon equation, obtaining an analytical solution. We also investigated the exact mapping of the charge-monopole and charge-dyon systems via the PDM Pauli equation, considering specific values of μ and msatisfying a given condition. This latter mapping was built for the case $j = \mu - 1/2$. Finally we perform the exact mapping of a quantum, scalar and neutral particle restricted to moving on a conical surface. In general the equations of exact mapping in the non-relativistic regime are non-linear and solve them numerically for the mass distribution M. The solutions were presented graphically and from them were determined the respective effective potentials, which represent our analogous models.

Keywords: Position-dependent effective mass systems, von Roos Hamiltonian, magnetic monopoles, conical space.

Lista de publicações

 A. G. M. Schmidt, A. L. Jesus. Mapping between charge-monopole and position-dependent mass systems. J. Math. Phys. 59, 102101 (2018).

Este trabalho foi selecionado em 2017 para uma apresentação em pôster no The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP) em Trieste, Itália.

- A. L. Jesus, A. G. M. Schmidt. Mapping between conical space and non-relativistic position-dependent effective mass systems. Phys. Scripta. 94, 085006 (2019).
- A. L Jesus, A. G. M. Schmidt. Mapping between charge-dyon and position-dependent mass systems. Aceito para publicação na revista Communications in Theoretical Physics (2019).
- A. L Jesus, A. G. M. Schmidt. Exact mapping between chargemonopole and position-dependent effective mass systems via Pauli equation. Submetido para publicação na revista Journal of Mathematical Physics.
- A. L Jesus, A. G. M. Schmidt. Exact mapping between chargedyon and position-dependent effective mass background via Pauli equation. Submetido para publicação na revista Physica B: Condensed Matter.

Capítulo 1

Introdução

Sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição, os quais abreviaremos daqui em diante como sistemas quânticos PDM, são sistemas físicos que possuem uma rica e interessante estrutura. Estes sistemas apareceram inicialmente no estudo de fenômenos de transporte em semicondutores de uma composição química dependente de posição, dentro de um contexto voltado muitas vezes para o desenvolvimento da tecnologia de dispositivos eletrônicos [1, 2]. A dinâmica do movimento de partículas quânticas elétrons ou buracos — em materiais semicondutores de composição química não-uniforme pode ser modelada em termos de uma estrutura teórica, onde a matéria se comporta como se efetivamente a massa dependesse da posição (para relembrar o conceito de massa efetiva m^* , consulte o apêndice C). A teoria da massa efetiva variável tem sido bastante investigada nos últimos anos e tem ganhado relevante importância no estudo de diversos campos da Física, principalmente na Física da Matéria Condensada. Para iniciar existe o chamado problema do ordenamento, uma vez que, como a massa depende da posição, não há uma maneira única de escrever o Hamiltoniano, que na forma mais geral é conhecido como Hamiltoniano de von Roos [1]. Dutra e Almeida [4] introduziram um critério para decidir se uma determinada parametrização é fisicamente admissível e, até onde sabemos, apenas duas delas cumprem o teste: as parametrizações de Zhu-Kroemer [5] e de Mustafa-Mazharimousavi [6].

Em termos de aplicações, sistemas quânticos PDM podem modelar o espalhamento em heteroestruturas abruptas [8], podem ser utilizados no estudo de semicondutores, pontos e anéis quânticos [9, 10, 11, 12, 13], no cálculo das funções de Green [14], nos efeitos *cloaking*, onde propõe-se criar um efeito de invisibilidade de partículas com massa [15], no movimento coletivo de núcleos deformados [16], na reconstrução de pacotes de ondas — wave-packet revival - coma massa tendo uma dependência radial ou angular [17, 18] e nos osciladores harmônicos [19, 20]. Considerando um sistema físico clássico, temos a realização experimental de um tipo de força de atrito inversa ou anti-amortecimento [21] e ainda um curioso efeito de massa negativa [22]. Sistemas quânticos PDM também foram investigados por Yu, Dong e coautores, resultando em uma série de importantes trabalhos, entre os quais temos as soluções da equação de Schrödinger PDM para o potencial de Morse [23], a análise geral sobre a possibilidade de se resolver a equação de Schrödinger com massa espacialmente dependente [24], as soluções exatas da equação de Schrödinger PDM para um potencial do tipo hardcore [25], a abordagem algébrica para a equação de Schrödinger PDM para um oscilador singular [26] e a solução da equação de Dirac com massa dependente da posição para um campo escalar e Coulombiano em um espaço-tempo cônico [27]. A interação entre sistemas quânticos PDM e campos magnéticos externos também foi estudada por Dutra e Oliveira [28].

Uma outra area da Física bastante interessante e rica é aquela que investiga os monopolos magnéticos (por economia de linguagem, na maioria das vezes escreveremos apenas monopolo) e apesar do mesmo ainda não ter sido observado na natureza, os físicos exploram essa riqueza a partir de diferentes pontos de vista: P. Dirac, em seu célebre trabalho publicado em 1931 [29], explicou a quantização da carga elétrica devido à presença de monopolos magnéticos. A própria condição de quantização [30, 31] também tem sido estudada. Wu e Yang [32, 33] resolveram analiticamente o problema cargamonopolo não-relativístico e mostraram argumentos físicos para eliminar a chamada corda de Dirac, que é um conjunto de pontos singulares ao longo de uma direção arbitrária. Monopolos não-abelianos foram introduzidos por 't Hooft e Polyakov e são uma consequência natural das equações de Yang-Mills [34, 35, 36].

Do ponto de vista experimental também há muita pesquisa e a Física do monopolo magnético foi reproduzida em sistemas de gelo de spin [37, 38, 39] bem como, mais recentemente, em campos quânticos [40], campos magnéticos sintéticos [41], em ímãs quirais [42] e também usando metamateriais [43]. Um modelo experimental análogo a um monopolo magnético foi criado por Béché et al. usando uma agulha magnética finíssima em escala nanoscópica [44]. Bendtz et al. iniciou uma busca por monopolos magnéticos reais, e não por sistemas análogos, analisando cuidadosamente rochas vulcânicas originadas das regiões árticas e antárticas, porém não foram encontradas quaisquer evidências de cargas magnéticas isoladas nesta investigação [45]. Um modelo análogo teórico foi estudado por Moody et al. usando um Hamiltoniano de rotação nuclear e experimentos de spin-ressonância foram propostos para observar tal equivalência [46]. É importante comentar também que recentemente Tiurev, Kuopanportti e Möttönen realizaram experimentalmente a criação de um par monopolo-antimonopolo de Dirac em um condensado de Bose-Einstein com spin 1 [47].

Dyon é uma partícula hipotética, assim como o monopolo magnético, mas possuindo simultaneamente cargas elétrica e magnética. A ideia sobre dyons foi inicialmente proposta pelo físico Julian Schwinger, em 1969, como uma alternativa fenomenológica ao modelo dos quarks [48]. Em seu artigo, Schwinger especula que hádrons são compostos por esses dyons, possuindo cargas elétricas e magnéticas fracionárias e seguindo a ideia da interação eletrofraca, com seus bósons vetoriais trocando cargas elétricas, ele postulou a existência de um bóson vetorial S (strong) de carga magnética unitária intermediando o processo de troca de carga para o dyon.

Sistemas quânticos bidimensionais tem sido extensivamente utilizados na física da matéria condensada e dentro deste contexto, o chamado espaço cônico, que tem sido estudado por vários autores nos últimos anos [49, 50, 51], oferece uma das geometrias não-triviais mais simples porque é localmente plano em todos os lugares, exceto no seu vértice, onde existe uma singularidade. A singularidade não afeta a dinâmica local, porém afeta a global. Essa geometria cônica não-trivial aparece como uma espécie de geometria efetiva em várias situações físicas, como defeitos em cristais líquidos [52], assim como defeitos em meios elásticos [53]. É importante mencionar que entre os vários trabalhos relacionados com este assunto, temos a investigação sobre calor específico de uma partícula neutra no cone [54], a investigação sobre a dinâmica quântica de uma partícula pontual no espaço cônico [55, 56], a investigação sobre a dinâmica quântica não-relativística em um cone com e sem um potencial limitante [57] e o estudo sobre o movimento quântico em um cone [58].

Com o objetivo de investigar se existe um sistema quântico PDM que tenha a mesma física (chamaremos de modelo análogo) que um sistema composto por uma partícula quântica (por economia de linguagem, na maioria da vezes escreveremos apenas partícula) eletricamente carregada interagindo com um monopolo magnético ou um dyon (daqui em diante abreviaremos como sistema carga-monopolo e carga-dyon, por simplicidade) ou que tenha a mesma física que uma partícula quântica escalar e neutra, vinculada a um espaço cônico (estes sistemas serão identificados como sistema alvo), recorremos à própria equação de Schrödinger livre PDM, substituindo a função de onda exata do sistema alvo nesta equação para obter uma outra equação diferencial parcial (EDP) não-linear para a distribuição de massa M. Podemos dizer então que:

Estas EDP e suas soluções serão o objetivo principal da tese, pois representam os nossos modelos análogos dos sistemas alvos apresentados.

Outros modelos análogos para sistemas incluindo monopolos (antimonopolos) magnéticos já foram obtidos experimentalmente e investigados ao longo dos últimos anos por diversos autores. Listaremos alguns destes recentes trabalhos na tabela 1.1.

Em suma, buscaremos por um modelo análogo, representado por uma distribuição de massa M dependente unicamente das coordenadas espaciais, que reproduza exatamente as conhecidas funções de onda de Wu-Yang no caso do sistema carga-monopolo, ou as funções de onda de um sistema carga-dyon, ou as funções de onda de uma partícula escalar e neutra, vinculada ao espaço cônico. Assim, esses sistemas podem ser mapeados de forma exata e seria possível então modelar tais sistemas, ou até mesmo outros, usando um sistema quântico PDM. Um sistema controlado de matéria condensada poderia ser usado, por exemplo, para reproduzir a física do monopolo magnético de

Sistema alvo	Modelo análogo	Autores / ano	
Monopolo-antimonopolo	Condensado de Bose-Einstein	Tiurev et al./2019 [47]	
Monopolo-antimonopolo	Gelo de spin	Castelnovo et al./2018 [37]	
Monopolo isolado	Metamateriais	Wang et al./2014 [43]	
Monopolo Isolado	Condensado de Bose-Einstein	Ray et al./2014 [40]	
Monopolo Isolado	Agulha nanoscopicamente fina	Béché et al./ 2013 [44]	
Monopolo e corda de Dirac	Gelo de spin	Morris et al./ 2009 [38]	

Tabela 1.1: Seleção de alguns trabalhos experimentais recentes sobre modelos análogos que reproduzem a Física do monopolo (antimonopolo) magnético.Também são apresentados seus respectivos autores e ano de publicação.

Dirac, mesmo que este não exista na natureza. Assim, nosso modelo análogo para estes sistemas é composto basicamente por uma partícula quântica, com massa efetiva dependente da posição — que também pode ser interpretada como uma partícula quântica, eletricamente carregada e de massa constante interagindo com um potencial efetivo U_{eff} , que por sua vez depende também da distribuição de massa M e das suas derivadas em relação às coordenadas espaciais.

A presente tese está organizada da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentaremos cronologicamente os diversos Hamiltonianos propostos para sistemas quânticos PDM, devido a vários autores e o problema do ordenamento, que permeia estes sistemas. Dedicamos uma atenção especial para os trabalhos de von Roos [1] e para o seu Hamiltoniano, que se constitui em uma proposta possivelmente adequada para sintetizar vários outros Hamiltonianos em um único operador. Embora o Hamiltoniano proposto posteriormente por Dutra e Almeida seja mais geral, utilizaremos o proposto por von Roos no decorrer de todo o trabalho. Também discutiremos um importante critério devido a Dutra e Almeida [4], que se constitui em um parâmetro orientador para conhecermos qual tipo de ordenamento leva a um Hamiltoniano fisicamente admissível.

No capítulo 3 trataremos do mapeamento aproximado e exato entre o sistema carga-monopolo e um sistema quântico PDM: no caso aproximado fixaremos uma distribuição de massa na equação de Schrödinger PDM com o potencial vetor de Dirac [28] e verificaremos as condições na função de onda para que um sistema PDM reproduza aproximadamente um sistema cargamonopolo; No caso exato construiremos, a partir da equação de Schrödinger livre PDM e da função de onda de Wu-Yang, a EDP para a distribuição de massa M, esta equação é não-linear e não pode ser resolvida utilizando a conhecida técnica de separação de variáveis. Faremos a suposição de que a distribuição de massa depende inicialmente só da coordenada angular e posteriormente só da coordenada radial e consideraremos também que esta distribuição não depende do ângulo azimutal (simetria azimutal). A EDP então se desdobrará em equações diferenciais ordinárias (EDO) não-lineares, que serão resolvidas numericamente. As soluções numéricas serão apresentadas na forma de gráficos para determinados autovalores de energia (o espectro aqui é contínuo). A partir das soluções, os potenciais efetivos também podem ser determinados e seus gráficos serão apresentados para os mesmos autovalores de energia.

No capítulo 4 trataremos somente do mapeamento exato de um sistema carga-dyon em um sistema quântico PDM. Iniciaremos este capítulo com a construção da EDP não-linear do mapeamento exato da mesma forma como foi feito no capítulo anterior, utilizando agora as autofunções para uma partícula carregada na presença de um dyon. Consideraremos, entretanto, somente uma dependência radial da massa e a EDP se converterá em uma EDO não-linear, que também será resolvida numericamente e os resultados serão apresentados na forma de gráficos, assim como as curvas do potencial efetivo. Em seguida faremos o mapeamento de um sistema carga-dyon no regime relativístico, via equação de Klein-Gordon PDM, veremos que neste caso podemos obter diretamente soluções analíticas para a distribuição de massa.

No capítulo 5 realizaremos o mapeamento exato de um sistema cargamonopolo em um sistema PDM, mas considerando que a partícula carregada, que interage com o monopolo, possui spin 1/2 (férmion) no regime nãorelativístico. O mapeamento será feito então com a utilização da equação de Pauli livre PDM, de onde obteremos um sistema desacoplado com duas EDP não-lineares. Aqui também consideraremos que a distribuição de massa depende somente da coordenada radial. As EDO não-lineares resultantes terão solução simultânea em um certo intervalo da coordenada radial somente para valores específicos de μ e do número quântico magnético orbital m, satisfazendo aproximadamente uma determinada desigualdade. Analisaremos o mapeamento exato para o caso envolvendo o espectro do número quântico momento angular total j, iniciando do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ (o caso envolvendo o espectro iniciando do valor mínimo $j = \mu + 1/2$ não será tratado nesta tese e será deixado como um trabalho futuro). As soluções das EDO não-lineares, que fornecem o nosso modelo análogo, serão obtidas por meio de cálculo numérico e os resultados para as distribuições de massa e para os respectivos potenciais efetivos serão apresentados por meio de gráficos.

No capítulo 6 daremos continuidade ao mapeamento exato não-relativístico com spin 1/2, via equação de Pauli livre PDM, utilizando agora como sistema alvo um sistema carga-dyon. Considerando as mesmas condições de resolução do capítulo anterior, os resultados também sendo apresentados na forma de gráficos.

No capítulo 7 realizaremos o mapeamento exato de uma partícula escalar e neutra, vinculada a um espaço cônico, em um dado sistema quântico PDM. Construiremos a EDP partindo novamente da equação de Schrödinger livre PDM e da autofunção exata de uma partícula neutra em um espaço cônico. A EDP do mapeamento exato se converterá em uma EDO sob a condição de que a distribuição de massa dependa somente da coordenada radial. Assim, como nos capítulos anteriores, resolveremos esta EDO numericamente e apresentaremos graficamente os resultados para certos autovalores de energia. O espectro de energia neste caso é discreto, devido a condição vincular da partícula, sendo os autovalores de energia proporcionais aos zeros da função de Bessel. As curvas do potencial efetivo correspondentes também serão apresentadas para estes autovalores. Na última seção do capítulo faremos uma aproximação na EDO para pequenos valores da coordenada radial ρ e seremos capazes de obter uma expressão analítica para a distribuição de massa M.

No capítulo 8 apresentaremos um sumário das conclusões gerais da tese, bem como perspectivas para futuras investigações.

Capítulo 2

O Hamiltonian de von Roos e o problema do ordenamento

Neste capítulo apresentaremos os diversos Hamiltonianos propostos ao longo do tempo para sistemas quânticos PDM e daremos uma atenção especial para o Hamiltoniano de von Roos, que nos permite obter os demais Hamiltonianos por meio da escolha de um conjunto particular de parâmetros. Falaremos do problema do ordenamento envolvendo estes parâmetros, que é uma característica dos sistemas quânticos PDM. Por fim, discutiremos resumidamente o critério de Dutra e Almeida, que é um importante teste para selecionar aqueles ordenamentos fisicamente admissíveis.

2.1 Hamiltonianos para sistemas com massa efetiva dependente da posição

Sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição têm sido alvo de interesse ao longo das últimas décadas e vários trabalhos relacionados com este assunto estão disponíveis na literatura [1 - 27]. Embora a massa efetiva possa ser uma função das coordenadas espaciais, do tempo ou de ambos, neste trabalho consideraremos somente uma dependência espacial e conforme foi mencionado no início do capítulo anterior, sistemas com esta dependência serão chamados sistemas quânticos PDM. É importante mencionar que estes sistemas físicos guardam propriedades interessantes e conduzem a uma questão ainda não resolvida na Física: o chamado *problema do ordenamento* na representação do operador cinético. Este problema surge do fato do operador momento P_i não comutar com o operador massa m, já que a mesma agora é uma função do operador posição x_i . Assim, a relação fundamental de comutação para sistemas quânticos PDM, que dá origem aos aspectos mais intrigantes destes sistemas, não é nula, isto é,

$$[m(x_i), P_i] \neq 0, \tag{2.1}$$

esta não-comutatividade do operador massa com o operador momento é uma questão fundamental e implica diretamente em um operador energia cinética não mais hermitiano, o que não é adequado para um operador quântico representando um observável físico. Assim, é necessário alterar este operador para que o mesmo satisfaça os pré-requisitos impostos pela mecânica quântica. A tentativa de uma construção do operador cinético que satisfaça principalmente a hermiticidade conduz a vários operadores, que são aplicados a diversos sistemas físicos em diferentes contextos [5, 6, 62, 63, 65, 66], mas que não são equivalentes. Desta forma surge um problema de ambiguidade envolvendo estes operadores e este problema introduz na teoria um certo conjunto de parâmetros, sendo que a escolha correta destes parâmetros está relacionada à questão da hermiticidade do operador cinético. Não há um consenso de qual escolha para estes parâmetros seria a mais adequada, normalmente leva-se em consideração critérios físicos como as condições de continuidade com a fronteira de uma heterojunção abrupta [5, 62, 65], simetrização [63] e assim por diante, implicando de certa forma em muitas possibilidades de escolha destes parâmetros. A questão envolvendo a escolha de tais parâmetros recebe o nome de *problema do ordenamento*. Embora muito esforços tenham sido feitos no sentido de elucidar e resolver definitivamente esta questão, o problema do ordenamento ainda é um problema em aberto na Física.

Vamos estabelecer algumas convenções que serão utilizadas neste capítulo e, salvo o contrário, no restante da tese: a distribuição de massa (ou função massa) $m(x_i)$ — onde x_i é uma coordenada espacial — que originalmente deveria aparecer nos Hamiltonianos cinéticos será substituída pela distribuição de massa $M(x_i)$. A relação entre ambas as distribuições é dada pela expressão,

$$M(x_i) = 2m(x_i), \tag{2.2}$$

O argumento da distribuição de massa também será frequentemente omitido por questões de simplicidade, isto é, $M(x_i)$ será escrita simplesmente como M. Em relação ao sistema de unidades, utilizaremos as chamadas unidades naturais da eletrodinâmica quântica (Gaussianas), a saber: $\hbar = m_e = c =$ $k_0 = 1$ e $e = \sqrt{\alpha}$, onde k_0 é a constante eletrostática no vácuo e α é a chamada constante de estrutura fina, cujo valor aproximado é $\alpha \approx 1/137$. No capítulo 7, entretanto, utilizaremos as chamadas unidades atômicas de Rydberg, a saber: $\hbar = 2m_e = k_0 = 1, c = 2/\alpha$ e $e = \sqrt{2}$.

Vamos retornar para a questão principal do capítulo, isto é, enumerar as diversas propostas para os operadores cinéticos apresentadas ao longo das últimas décadas. Muitas expressões para o Hamiltoniano cinético associado a sistemas quânticos PDM foram então propostas, sendo que a primeira delas foi para o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke, proposto em 1966 [62], tal trabalho foi baseado no antigo modelo eletrônico de Bethe-Sommerfeld [59, 60, 61] e sua generalização para uma condutância através de uma junção abrupta do *GaAs*. Os autores concluíram que para haver a conservação da corrente entre uma junção de dois materiais relacionados a massas efetivas distintas, o Hamiltoniano cinético para o modelo de um elétron precisava ser dado por,

$$H_{BD} = -\vec{\nabla} \frac{1}{M} \vec{\nabla}, \qquad (2.3)$$

neste Hamiltoniano a hermiticidade é satisfeita. Tal Hamiltoniano é utilizado em situações onde existe uma variação abrupta da massa efetiva do elétron, como ocorre na junção de dois materiais distintos. Os autores também propõe um modelo simples de junções para produzir barreiras de potenciais para as quais a equação de Schrödinger, incorporando um elétron, pode ser resolvida de forma analítica.

Gora e Willians propuseram em 1969 [63] um Hamiltoniano que inicialmente não é hermitiano. Este fato resultou em problemas relacionados aos autovalores, entretanto eles implementaram uma simetrização no operador de forma a recuperar a sua hermiticidade, resultando assim na seguinte expressão,

$$H_{GW} = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{M} \nabla^2 + \nabla^2 \frac{1}{M} \right], \qquad (2.4)$$

outras simetrizações foram discutidas pelos autores, o que levantou uma discussão acerca da existência de um único operador energia cinética para sistemas quânticos PDM.

Em 1982, Zhu e Kroemer [5], estudando funções de onda com massa efetiva através de uma heterojunção abrupta entre dois semicondutores distintos e com o objetivo de evitar problemas com a conservação da massa na interface da heterojunção, propuseram o seguinte Hamiltoniano para a massa efetiva dependente da posição,

$$H_{ZK} = -\frac{1}{\sqrt{M}} \nabla^2 \frac{1}{\sqrt{M}},\tag{2.5}$$

tal Hamiltoniano também foi obtido posteriormente do Hamiltoniano de Dirac no limite não-relativístico, envolvendo uma massa efetiva dependente da posição, por meio de uma transformação de Foldy-Wouthuysen [64].

Em 1983, O. von Roos [1] propôs um Hamiltoniano cinético para massa efetiva dependente da posição, incorporando cada um dos Hamiltonianos vistos até então como casos especiais. O autor utilizou um conjunto de constantes, também conhecidos como parâmetros de ambiguidade α , $\beta \in \gamma$, que obedecem a um determinado vínculo. O Hamiltoniano de von Roos será apresentado mais detalhadamente na próxima seção devido à sua importância neste trabalho, aqui apenas o mencionamos para obedecer a ordem cronológica dos desenvolvimentos.

Morrow e Brownstein propuseram em 1984 [65] um Hamiltoniano para massa efetiva variável, os autores estavam estudando condições para funções de onda em heterojunções abruptas. Este Hamiltoniano é escrito como,

$$H_{MB} = -M^{\alpha} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\alpha}, \qquad (2.6)$$

este operador é um caso especial do Hamiltoniano de von Roos para $\alpha = \gamma$.

Em 1993, Li e Khun [66], investigando os Hamiltonianos já conhecidos para a massa efetiva dependente da posição, propuseram uma forma de simetrização para a construção destes Hamiltonianos, tendo em mente o objetivo de modelar sistemas quânticos em heterojunções abruptas. O Hamiltoniano proposto por estes autores pode ser escrito como,

$$H_{LK} = -\frac{1}{2} \left[M^{\alpha} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} + \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\alpha} \right], \qquad (2.7)$$

este operador é um caso especial do Hamiltoniano de von Roos, se considerarmos $\gamma = 0$.

Em 2007, Mustafa e Mazharimousavi [6] sugeriram um caso particular do Hamiltoniano de Morrow e Brownstein (2.6) fixando $\alpha = -1/4$ e $\beta = -1/2$. Os autores utilizaram um modelo quântico de um elétron quase livre. Este Hamiltoniano é escrito como,

$$H_{MM} = -\frac{1}{\sqrt[4]{M}} \vec{\nabla} \frac{1}{\sqrt{M}} \vec{\nabla} \frac{1}{\sqrt[4]{M}}, \qquad (2.8)$$

os valores escolhidos para $\alpha \in \beta$ satisfazem o critério de Dutra e Almeida [4] e por esta razão é uma das parametrizações fisicamente aceitáveis.

2.2 Hamiltoniano de von Roos

Em 1983, O. von Roos apresentou em seu artigo [1] uma versão generalizada para os operadores cinéticos conhecidos até então e neste trabalho o autor chegou a dois resultados: que o respectivo operador proposto por ele, embora hermitiano, não é um invariante Galileano. Isto significa que, se considerarmos tal operador, a física descrita por um observador em um referencial inercial em repouso em relação a uma amostra de composição química nãouniforme não é a mesma física descrita por um observador em um referencial inercial em movimento retilíneo, uniforme e não-relativístico com relação a esta mesma amostra. Entretanto este aspecto foi investigado posteriormente por Jean-Marc em [3], onde o autor contorna o problema definindo uma transformação instantânea de Galileo, recuperando assim a simetria Galileana dos sistemas quânticos PDM. von Roos também discutiu a não-unicidade de seu operador cinético, isto é, este poderia representar diferentes sistemas físicos, dependendo do ordenamento utilizado. O autor afirmou no final de seu artigo o possível equívoco em se trabalhar com sistemas quânticos PDM e comentou que devêssemos evitá-los, contudo veremos neste trabalho que tais sistemas oferecem um campo amplo de investigação e rico em resultados tanto teóricos quanto experimentais.
Vamos então apresentar o Hamiltoniano proposto por von Roos em seu artigo, onde se argumenta que a dependência da massa com a posição pode ser modelada em mecânica quântica por meio do chamado *Hamiltoniano de von Roos*,

$$H_{roos} = -\frac{1}{2} \left[M^{\alpha} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\gamma} + M^{\gamma} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\alpha} \right] + V_{ext}, \qquad (2.9)$$

onde α , β e γ são os parâmetros de ambiguidade de von Roos e V_{ext} é um potencial externo. Os parâmetros de von Roos devem ser reais e satisfazer o vínculo,

$$\alpha + \beta + \gamma = -1, \tag{2.10}$$

este vínculo é necessário se quisermos recuperar a expressão usual para o Hamiltoniano cinético no limite da massa efetiva constante, além de garantir que a expressão seja dimensionalmente correta (dimensão de energia). O Hamiltoniano não é único, pois os operadores momento linear $P_i = -i\nabla_i$ e massa dependente da posição $m(x_i)$ não comutam, conforme discutido anteriormente. Diversas questões surgem imediatamente: como escolher os parâmetros α , β e γ ? Que critérios físicos devemos impor sobre estes parâmetros? Existe uma maneira de selecionar quais destes Hamiltonianos são realizados na natureza? Certamente a característica de ter um espectro real, a conservação da corrente de probabilidade e a concordância com resultados experimentais devem servir como guias para respondermos a estas perguntas. Entretanto estas questões ainda não estão todas respondidas e este problema, conforme já dissemos antes, é o chamado problema do ordenamento.

Portanto, o Hamiltoniano (2.9) se reduz, para uma dada escolha dos parâmetros α , $\beta \in \gamma$, a todos aqueles vistos anteriormente. Ocorre que podemos ter alguns Hamiltonianos que não podem ser obtidos desta expressão, como por exemplo, o Hamiltoniano utilizando o ordenamento de Weyl [67],

$$H_W = -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{M} \nabla^2 + 2\vec{\nabla} \frac{1}{M} \vec{\nabla} + \nabla^2 \frac{1}{M} \right].$$
 (2.11)

Dutra e Almeida [4], no início dos anos 2000, propuseram um Hamiltoniano cinético mais geral do que o Hamiltoniano de von Roos (2.9) com o objetivo de incorporar todos os operadores vistos até aqui, incluindo o caso (2.11). Tal Hamiltoniano é dado pela seguinte expressão,

$$H_{DA} = -\frac{1}{2(a+1)} \left[a \left(\frac{1}{M} \nabla^2 + \nabla^2 \frac{1}{M} \right) + M^{\alpha} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\gamma} + M^{\gamma} \vec{\nabla} M^{\beta} \vec{\nabla} M^{\alpha} \right],$$
(2.12)

onde se fizermos o parâmetro a = 0 recuperamos o Hamiltoniano de von Roos. Ao longo do trabalho sempre consideraremos esta situação, isto é, trabalharemos somente com o Hamiltoniano de von Roos (2.9).

Assim, até a publicação do trabalho de von Roos [1], diversos Hamiltonianos foram estudados na literatura e aplicados em problemas de diversas áreas da Física. Em termos dos parâmetros de ambiguidade α, β, γ , temos um conjunto particular de valores destes parâmetros para cada Hamiltoniano proposto, então podemos classificar algumas das diversas parametrizações existentes: a de Gora e Williams ($\alpha = -1$, $\beta = \gamma = 0$), de BenDaniel e Duke ($\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$), de Li e Kuhn ($\gamma = 0$, $\beta = \alpha = -1/2$), de Zhu e Kroemer (ZK) ($\alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0$), e de Mustafa e Mazharimousavi (MM) ($\alpha = -1/4, \beta = -1/2, \gamma = -1/4$). Resumimos na tabela 2.1 estas parametrizações e os problemas físicos em que elas foram aplicadas.

Sistemas com massa dependente da posição podem também ser interpretados de outra maneira, isto é, como sendo sistemas de massa constante sujeitos a um determinado potencial efetivo U_{eff} que depende dos parâmetros α, β, γ , da distribuição M e de suas derivadas. Isto significa que o Hamilto-

Autores	Parâmetros	Aplicado em	
Morrow e Brownstein [65]	$\alpha = \gamma$	Heterojunções abruptas	
Gora e Williams [63]	$\alpha=-1,\beta=\gamma=0$	Transporte eletrônico	
BenDaniel e Duke [62]	$\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$ Tunelamento em semicondutor		
Li e Kuhn [66]	$\gamma=0,\beta=\alpha=-1/2$	Poços quânticos $GaAs$	
Zhu e Kroemer [5]	$\alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0$ Condições de contorno em interfac		
MM [6]	$\alpha = \gamma = -1/4, \beta = -1/2$	Ordenamento do Hamiltoniano	

Tabela 2.1: Resumo de algumas parametrizações do Hamiltoniano de von Roos estudadas na literatura.

niano de von Roos pode ser escrito de uma forma em que os parâmetros de ambiguidade estejam todos dentro deste potencial efetivo U_{eff} [68]. Vamos considerar a partir de agora que o potencial externo sempre será nulo, isto é, $V_{ext} = 0$. Desta maneira o Hamiltoniano de von Roos (2.9) passa a ser puramente cinético, sendo a partir daqui renomeado como H_0 por simplicidade. Assim, vamos encontrar uma expressão alternativa para este operador, que será mais conveniente para o nosso trabalho. Aplicando o operador H_0 em uma função de onda ψ e trabalhando inicialmente a parcela à esquerda deste operador, temos,

$$M^{\alpha}\vec{\nabla}M^{\beta}\vec{\nabla}M^{\gamma}\psi = M^{\alpha}\vec{\nabla}M^{\beta}(M^{\gamma}\vec{\nabla}\psi + \gamma M^{\gamma-1}\vec{\nabla}M\psi), \qquad (2.13)$$

distribuindo agora o termo M^{β} na soma dentro dos parênteses e aplicando em seguida o gradiente $\vec{\nabla}$, temos,

$$\vec{\nabla} M^{\beta} (M^{\gamma} \vec{\nabla} \psi + \gamma M^{\gamma - 1} \vec{\nabla} M \psi) = M^{\beta + \gamma} \nabla^{2} \psi + \gamma M^{\beta + \gamma - 1} \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} M$$
$$+ \beta M^{\beta + \gamma - 1} \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} M + \gamma M^{\beta + \gamma - 1} \psi \nabla^{2} M + \gamma (\gamma - 1) M^{\beta + \gamma - 2} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M \psi$$
$$+ \beta \gamma M^{\gamma + \beta - 2} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M \psi + \gamma M^{\gamma + \beta - 1} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi, \qquad (2.14)$$

multiplicando a expressão acima pela esquerda por M^{α} e utilizando o vínculo

(2.10), obtemos a primeira parcela do Hamiltoniano de von Roos reescrita de uma outra maneira,

$$M^{\alpha}\vec{\nabla}M^{\beta}\vec{\nabla}M^{\gamma}\psi = M^{-1}\nabla^{2} + \gamma M^{-2}\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}\psi + \beta M^{-2}\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}\psi + \gamma M^{-2}\psi\nabla^{2}M + \gamma(\gamma-1)M^{-3}\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}M\psi + \beta\gamma M^{-3}\psi\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}M + \gamma M^{-2}\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}\psi.$$
(2.15)

Para a obtenção da segunda parcela, não precisamos repetir todos os cálculos, basta trocarmos,

$$\alpha \to \gamma, \qquad \gamma \to \alpha \qquad e \qquad \beta \to \beta,$$
 (2.16)

assim, substituindo estas parcelas em (2.9), reunindo os termos semelhantes e simplificando, chegamos na seguinte expressão,

$$H_{0}\psi = -\frac{1}{2} \left[\frac{2}{M} \nabla^{2} + \frac{2(\alpha + \beta + \gamma)}{M^{2}} \vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla} + \frac{(\gamma + \alpha)}{M^{2}} \nabla^{2}M + \frac{[\gamma(\gamma - 1) + \beta\gamma + \alpha(\alpha - 1) + \beta\alpha]}{M^{3}} \vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}M \right] \psi, \qquad (2.17)$$

escrevendo os coeficientes em termos de α e β somente, com a ajuda da expressão (2.10), obtemos finalmente o Hamiltoniano escrito de uma maneira onde os coeficientes de ambiguidade estão todos dentro de um potencial, chamado *potencial efetivo* U_{eff} . A expressão final é então [68],

$$H_0 = -\frac{1}{M}\nabla^2 + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla} + U_{eff},$$
 (2.18)

conforme mencionado anteriormente, esta expressão será utilizada ao longo de todo o trabalho. O potencial efetivo U_{eff} possui a seguinte expressão em termos de parâmetros de ambiguidade $\alpha \in \beta$,

$$U_{eff} = \frac{(\beta+1)}{2} \frac{\nabla^2 M}{M^2} - [\alpha(\alpha+\beta+1)+\beta+1] \frac{\vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M}{M^3}, \qquad (2.19)$$

observe que o potencial efetivo muda de acordo com a escolha da parametrização. A equação de Schrödinger PDM pode ser construída a partir de uma equação de autovalor, utilizando o Hamiltoniano (2.18),

$$H_0\psi = E\psi \tag{2.20}$$

ou, de forma explícita,

$$-\frac{1}{M}\nabla^2\psi + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi + U_{eff}\psi = E\psi, \qquad (2.21)$$

onde E é um autovalor de energia e ψ , uma autofunção de onda. É importante estabelecer que nesta tese trabalharemos somente com a parametrização de Zhu-Kroemer [5], que é uma das parametrizações fisicamente admissíveis pelo critério de Dutra e Almeida [4], relembrando,

$$\alpha = -\frac{1}{2}, \qquad \beta = 0, \qquad \gamma = -\frac{1}{2},$$
 (2.22)

utilizando esta parametrização, o potencial efetivo (2.19) assume então a seguinte expressão,

$$U_{eff} = \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 M}{M^2} - \frac{3}{4} \frac{\vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M}{M^3}.$$
 (2.23)

Esta importante resultado será bastante utilizado em nosso trabalho. Sempre que utilizarmos a equação de Schrödinger livre PDM (2.21), incorporaremos o potencial efetivo dado por (2.23). As curvas referentes a este potencial efetivo também serão apresentadas nos capítulos seguintes para cada distribuição de massa M.

2.3 Critério de Dutra e Almeida

Em um trabalho publicado no ano 2000, Dutra e Almeida [4], partindo do Hamiltoniano de von Roos, reescreveram o Hamiltoniano de forma que os parâmetros ficassem todos no potencial, o que implicou em um Hamiltoniano com termos p^2 e com $(m'/m^2)p$ somados às contribuições da massa e das suas derivadas. A ambiguidade deixaria de existir se os parâmetros fossem tais que,

$$\alpha + \gamma - a = 0, \qquad \qquad a - \alpha \gamma - \alpha - \gamma = 0, \qquad (2.24)$$

onde o parâmetro a foi incluído à parte do ordenamento α, β, γ e pode ser ajustado. O Hamiltoniano de von Roos é recuperado quando colocamos a = 0. Desta maneira, estudando uma certa distribuição de massa, Dutra e Almeida reescreveram a equação de Schrödinger PDM para uma partícula como a equação usual, com massa constante, e com potencial externo dado pelo potencial de Morse, que escrevemos por motivo de completeza,

$$V(r) = V_0 \left[e^{-2(r-r_0)/d} - 2e^{-(r-r_0)/d} \right].$$

Neste estudo Dutra e Almeida investigaram analiticamente o espectro de energia resultante das parametrizações de BenDaniel e Duke [62] e também de Gora e Williams [63]. Ambas forneceram autovalores de energia complexos, o que torna seus Hamiltonianos inválidos fisicamente. Assim, apesar de listarmos estas parametrizações na tabela 2.1, e dos respectivos autores terem estudado certos sistemas físicos com elas — efeitos da carga elétrica no tunelamento de elétrons, e transporte eletrônico em semicondutores gradeados, respectivamente — , pelo critério de Dutra e Almeida elas não são admissíveis fisicamente.

Com esta imposição, Dutra e Almeida validaram as parametrizações de Zhu a Kroemer [5] e de Li e Kuhn [66]. No entanto, impondo condições de continuidade da corrente de probabilidade na interface de heteroestruturas constatou-se que a última não era adequada. Em 2007, Mustafa e Mazharimousavi [6] propuseram um outro conjunto, que obedece tanto ao critério de Dutra e Almeida, quanto à conservação da probabilidade em heteroestruturas. Atualmente, estas são as duas únicas parametrizações conhecidas que satisfazem o critério de Dutra e Almeida.

O comportamento de pacotes de onda gaussianos, livres e também sujeitos a potenciais parabólicos confinantes, em poços quânticos circulares foi estudado por Schmidt e colaboradores em [7]. As parametrizações de ZK e de MM foram postas à prova e os tempos de *revival* foram calculados analiticamente, desta maneira um experimento foi proposto para verificar qual das duas seria de fato realizada neste tipo de sistema.

2.4 Conclusão

Apresentamos neste capítulo os diversos Hamiltonianos cinéticos propostos por vários autores para sistemas quânticos PDM e nos concentramos especialmente no Hamiltoniano de von Roos, já que este operador será utilizado ao longo de todo o trabalho. Do Hamiltoniano de von Roos obtemos a equação de Schrödinger PDM, juntamente com um potencial efetivo U_{eff} , o qual contém todos os parâmetros de ambiguidade α , $\beta \in \gamma$. Dentre as diversas parametrizações existentes (algumas resumidas na tabela 2.1), optamos pela escolha da parametrização de Zhu e Kroemer, que é uma das parametrizações que obedece o critério de Dutra e Almeida.

Capítulo 3

Mapeamento entre o sistema carga-monopolo e sistemas com massa efetiva dependente da posição

Neste capítulo construiremos o mapeamento aproximado e exato entre o sistema carga-monopolo (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo). No caso aproximado fixaremos uma distribuição de massa na equação de Schrödinger PDM com o potencial vetor de Dirac e investigaremos condições na função de onda para que um sistema quântico PDM reproduza aproximadamente um sistema carga-monopolo. No caso exato construiremos, a partir da equação de Schrödinger livre PDM e da função de onda do sistema alvo, uma EDP para a distribuição de massa M. Entretanto, a EDP para o nosso modelo análogo possui vários termos não-lineares e é demasiadamente complexa para ser resolvida analiticamente. Faremos a suposição de que a distribuição de massa M depende inicialmente só da coordenada angular e posteriormente só da coordenada radial e consideraremos também uma simetria azimutal. A EDP então se desdobrará em duas EDO, que ainda são não-lineares e que serão resolvidas numericamente. As soluções numéricas e os potenciais efetivos correspondentes serão apresentados graficamente.

3.1 Formulação do problema carga-monopolo em sistemas quânticos PDM

Nesta seção iremos introduzir o estudo do monopolo magnético em um cenário onde a massa efetiva de uma partícula escalar e eletricamente carregada, que interage com o mesmo, dependa da posição. Como veremos, o problema possuirá soluções analíticas, que podem ser obtidas a partir de um simples problema de autovalor. Neste capítulo utilizaremos a importante condição de quantização de Dirac [29], a saber,

$$eg = \frac{n}{2}, \qquad n \in \mathbb{Z}, \tag{3.1}$$

onde usaremos daqui em diante o símbolo μ para representar o produto da carga elétrica e com a magnética g, isto é, $\mu = eg$. Neste capítulo utilizaremos também coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Nossa distribuição de massa é uma função simples da coordenada radial e a expressão para esta distribuição é,

$$M(r) = m_c r^w, (3.2)$$

onde m_c é um coeficiente positivo com dimensão de massa e o expoente $w \ge 0$. Vamos iniciar o tratamento de sistemas quânticos PDM na presença de um campo magnético — esta investigação pode ser encontrada na referência [28]. O Hamiltoniano para uma partícula escalar carregada, com massa efetiva dependente da posição, na presença de um campo magnético dado pelo potencial vetor \vec{A} pode ser construído a partir de,

$$H = \frac{1}{M} (\vec{P} - e\vec{A})^2, \qquad (3.3)$$

onde e é a carga elétrica da partícula com massa efetiva dependente da posição. Desenvolvendo o quadrado, chegamos a uma expressão com três termos,

$$H = \frac{1}{M}\vec{P}^{2} - \frac{e}{M}(\vec{A}\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot\vec{A}) + \frac{e^{2}}{M}\vec{A}\cdot\vec{A},$$
 (3.4)

o primeiro termo, que é o termo puramente cinético, deverá ser substituído pelo operador de von Roos H_0 apresentado do capítulo anterior. Precisamos nos concentrar no segundo termo envolvendo os produtos entre $\vec{A} \in \vec{P}$. Assim, definimos,

$$\vec{A'} = \frac{2\vec{A}}{M},\tag{3.5}$$

vamos, por questão de conveniência, trabalhar o produto em coordenadas cartesianas. Logo,

$$\vec{A'} \cdot \vec{P} = A'_x P_x + A'_y P_y + A'_z P_z, \qquad (3.6)$$

aqui observamos que a expressão anterior é uma soma de três operadores da forma $f(x_i)P_i$. Analisando a situação, podemos trazer a questão do ordenamento para este operador estabelecendo uma expressão envolvendo alguns parâmetros de ambiguidade. Para a componente x, por exemplo, temos,

$$\hat{O}_x = \frac{1}{2} [f(x)^{\alpha} P_x f(x)^{\beta} + f(x)^{\beta} P_x f(x)^{\alpha}], \qquad (3.7)$$

considerando que os parâmetros de ambiguidade α e β obedecem ao vínculo,

$$\alpha + \beta = 1, \tag{3.8}$$

deixando claro que esses parâmetros $\alpha \in \beta$ não são os mesmos do ordenamento no Hamiltoniano de von Roos. A expressão (3.7) pode ser reescrita de outro modo, então colocando $\beta = 1 - \alpha$ e considerando que o operador \hat{O}_x atua em uma função de onda ψ , temos,

$$\hat{O}_x \psi = \frac{1}{2} \left[f(x)^{\alpha} P_x f(x)^{1-\alpha} + f(x)^{1-\alpha} P_x f(x)^{\alpha} \right] \psi = \frac{1}{2} \left[f(x)^{\alpha} f(x) P_x f(x)^{-\alpha} + P_x f(x) + f(x) f(x)^{-\alpha} P_x f(x)^{\alpha} \right] \psi,$$
(3.9)

aplicando o operador P_x nos produtos $f(x)^{-\alpha}\psi$ e $f(x)^{\alpha}\psi$ e fazendo as simplificações necessárias, obtemos,

$$\hat{O}_x\psi = \frac{1}{2}P_xf(x)\psi + f(x)P_x\psi + \frac{1}{2}f(x)\psi P_x[f(x)^{\alpha}f(x)^{-\alpha}], \quad (3.10)$$

podemos verificar que o terceiro termo da expressão anterior é nulo. Sabendose que $P_x = -i\partial/\partial x$, sendo *i* a unidade imaginária, chegamos na seguinte expressão para o operador \hat{O}_x ,

$$\hat{O}_x = -\frac{i}{2}\frac{\partial}{\partial x}f(x) - if(x)\frac{\partial}{\partial x},$$
(3.11)

o mesmo desenvolvimento pode ser feito para os termos $f(y)P_y$ e $f(z)P_z$. Assim, adicionando todos estes operadores e considerando $f(x_i) = \vec{A}'_i$, podemos construir a sua versão em três dimensões. Fazendo $\hat{O} = \hat{O}_x + \hat{O}_y + \hat{O}_z$, encontramos finalmente,

$$\hat{O} = -\frac{i}{2}\vec{\nabla}\cdot\vec{A'} - i\vec{A'}\cdot\vec{\nabla}, \qquad (3.12)$$

substituindo a equação (3.5) nesta última expressão, obtemos o seguinte resultado para o operador \hat{O} ,

$$\hat{O} = -\frac{2i}{M}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} - \frac{i}{M}\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \frac{i}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{A}, \qquad (3.13)$$

o Hamiltoniano para sistemas quânticos PDM interagindo com um campo magnético externo é dado então de forma abreviada por,

$$H = H_0 - \frac{e}{2}\hat{O} + \frac{e^2}{M}\vec{A} \cdot \vec{A},$$
 (3.14)

lembrando que o termo cinético H_0 é dado pela expressão (2.18). Usando a forma explícita do operador H_0 e do operador \hat{O} e considerando o calibre de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, podemos finalmente escrever o Hamiltoniano completo para o nosso sistema,

$$H = -\frac{1}{M}\nabla^2 + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla} + U_{eff} + \frac{2ie}{M}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} - \frac{ie}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{A} + \frac{e^2}{M}\vec{A}\cdot\vec{A}.$$
(3.15)

Para determinar o potencial efetivo U_{eff} para este sistema em particular, precisamos conhecer a distribuição de massa M e definir um ordenamento adequado para o Hamiltoniano. Nesta seção usaremos a parametrização de Zhu-Kroemer ($\alpha = \gamma = -1/2$ e $\beta = 0$) e a distribuição de massa dada pela expressão (3.2). Nestas condições o potencial efetivo assume a seguinte expressão,

$$U_{eff} = \frac{1}{2} \frac{w(w+1)}{Mr^2} - \frac{3}{4} \frac{w^2}{Mr^2},$$
(3.16)

onde w é um parâmetro não-negativo.

Nosso objetivo aqui é utilizar o potencial vetor \vec{A} de um monopolo magnético pontual situado na origem do sistema de coordenadas e por questões históricas, escolheremos a expressão do potencial vetor de Dirac [29, 30, 33, 34] para o monopolo magnético (para mais detalhes sobre este potencial, consulte o apêndice A). O potencial vetor de Dirac em coordenadas esféricas possui a seguinte expressão,

$$\vec{A} = \frac{g}{r} \frac{(1 - \cos\theta)}{\sin\theta} \hat{e}_{\phi}, \qquad (3.17)$$

onde g é a carga magnética do monopolo. Utilizando assim esta expressão para o potencial vetor (a qual implica diretamente em $\vec{\nabla}M \cdot \vec{A} = 0$) juntamente com o potencial efetivo U_{eff} no Hamiltoniano (3.15) e considerando um problema de autovalor, podemos construir a equação diferencial parcial (EDP) para este sistema,

$$-\frac{1}{Mr^{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) - \frac{1}{Mr^{2}\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{Mr^{2}\sin^{2}\theta}\frac{\partial^{2}\psi}{\partial\phi^{2}} + \frac{1}{M}\frac{\partial M}{\partial r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + U_{eff}\psi + \frac{2ie}{M}\left[\frac{g\left(1-\cos\theta\right)}{\sin\theta}\right]\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\phi} + \frac{e^{2}}{M}\left[\frac{g\left(1-\cos\theta\right)}{r}\right]^{2}\psi = E\psi, \qquad (3.18)$$

onde utilizamos as expressões dos operadores Laplaciano e gradiente em coordenadas esféricas. Aplicando a técnica usual de separação de variáveis, isto é, considerando a autofunção ψ como um produto de três funções coordenadas,

$$\psi = \psi(r, \theta, \phi) = F(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \qquad (3.19)$$

poderíamos obter um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDO) e resolvê-las individualmente. Veremos, entretanto, que as partes angulares $\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ não desacoplam, devido à presença do termo μ . Desta forma, iremos obter uma EDP para as partes angulares e uma EDO para a parte radial. Nas duas seções seguintes apresentaremos as soluções destas equações.

3.1.1 Equação angular

Vamos inicialmente analisar a equação angular do problema, que pode ser obtida por meio da técnica de separação de variáveis. Então aplicando esta técnica, implementando as simplificações necessárias e considerando a constante de separação C como sendo [34],

$$C = -l(l+1) + \mu^2 \tag{3.20}$$

onde l é o número quântico do momento angular orbital e $\mu = eg$. Podemos obter a seguinte equação angular do modelo,

$$-\frac{1}{\sin^2\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y_{\mu lm}}{\partial\theta} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial\phi} - i\mu [1 - \cos\theta] \right)^2 Y_{\mu lm} \right] + \mu^2 Y_{\mu lm}$$

= $l(l+1)Y_{\mu lm}$, (3.21)

uma verificação na equação angular nos permite concluir que não é possível a separação das coordenadas $\theta \in \phi$ aplicando novamente a técnica de separação de variáveis, devido à presença da constante μ . Desta forma, definimos a função $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$, que satisfaz a equação angular do sistema, conforme pode ser visto em [33, 34]. Tais funções são conhecidas como harmônicos esféricos generalizados ou harmônicos de monopolo. Essas funções são definidas como,

$$Y_{\mu lm}(\theta,\phi) = A \frac{P_{l+m}^{(-\mu-m,-\mu+m)}(\cos\theta) \exp[i(m+\mu)\phi]}{(1-\cos\theta)^{(\mu+m)/2}(1+\cos\theta)^{(\mu-m)/2}},$$
(3.22)

onde $P_n^{(a,b)}(\cos \theta)$ são os chamados polinômios de Jacobi e A é uma constante de normalização, que é dada por,

$$A = 2^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!(l+m)!}{4\pi(l-\mu)!(l+\mu)!}},$$
(3.23)

os números quânticos são tais que $l = \mu, \mu + 1, \dots$ e $-l \le m \le l$.

3.1.2 Equação radial

Faremos agora o estudo da parte radial do problema, veremos que esta situação é mais interessante, pois a dependência da massa é com a coordenada radial e portanto podemos esperar algo novo. A equação radial é escrita como,

$$-\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) + \frac{r^2}{M}\frac{dM}{dr}\frac{dF}{dr} + Mr^2(U_{eff} - E)F = CF, \qquad (3.24)$$

sendo U_{eff} o potencial efetivo. Usando a constante de separação (3.20), o potencial efetivo (3.16), a função massa (3.2) e realizando algumas simplificações, obtemos a equação radial em uma forma mais explícita,

$$r^{2}\frac{d^{2}F}{dr^{2}} + r(2-w)\frac{dF}{dr} + \frac{w}{2}\left(\frac{w}{2} - 1\right)F + \left[\mu^{2} - l(l+1)\right]F + 2m_{e}r^{2+w}EF = 0,$$
(3.25)

onde escolhemos $m_c = 2m_e$ em (3.2). No caso PDM, a equação angular tem a mesma forma da equação para o sistema carga-monopolo com massa constante, ou seja, tanto o caso envolvendo massa constante quanto o caso envolvendo massa dependente da posição possuem as mesmas autofunções angulares. A dependência com a massa irá aparecer somente na autofunção radial, que contém o parâmetro w. Vamos proceder utilizando uma técnica bem conhecida na literatura dos sistemas quânticos PDM, isto é, vamos introduzir a função y(r) relacionada a F(r) via,

$$F(r) = \sqrt{M(r)}y(r), \qquad (3.26)$$

submetida a esta transformação, a equação radial (3.25) assume a seguinte forma,

$$r^{2}\frac{d^{2}y}{dr^{2}} + 2r\frac{dy}{dr} + \left(k^{\prime 2}r^{2+w} - \left[l(l+1) - \mu^{2}\right]\right)y = 0, \qquad (3.27)$$

esta é uma equação diferencial semelhante a uma equação de Bessel esférica. Resolvendo esta equação, obtemos a seguinte solução geral,

$$y(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} J_{\ell+1/2} \left(k' r^{\frac{2+w}{2}} \right) + \frac{B}{\sqrt{r}} N_{\ell+1/2} \left(k' r^{\frac{2+w}{2}} \right), \qquad (3.28)$$

que é uma combinação linear de funções de Bessel e de Neumann, sendo A e *B* constantes arbitrárias. As constantes $\ell + 1/2$ e k' são dadas por,

$$\ell + 1/2 = \frac{\sqrt{(1+2l)^2 - 4\mu^2}}{2+w} \qquad \qquad k' = \frac{2k}{|2+w|}, \tag{3.29}$$

onde $k = \sqrt{2m_e E}$. Sabendo-se que a função de Neumann não é regular na origem, tomamos B = 0 e a solução geral se reduz simplesmente a,

$$y(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} J_{\ell+1/2} \left(k' r^{\frac{2+w}{2}} \right), \qquad (3.30)$$

e consequentemente a solução da parte radial do problema, isto é, a solução da equação (3.25) é dada por,

$$F_{\ell}(r) = Ar^{\frac{w-1}{2}} J_{\ell+1/2} \left(k' r^{1+w/2} \right), \qquad (3.31)$$

na próxima seção utilizaremos esta solução na construção do nosso mapeamento aproximado. O caso particular onde w = 0 — em outras palavras, quando a massa da partícula carregada é constante e igual a m_e — nós obtemos a bem conhecida função de onda radial de Wu-Yang para o sistema carga-monopolo, a saber,

$$F_{\ell}(r) = \frac{A'}{\sqrt{r}} J_{\ell+1/2}(kr), \qquad (3.32)$$

onde a ordem agora é,

$$\ell + 1/2 = \sqrt{(\ell + 1/2)^2 - \mu^2}.$$
(3.33)

A função radial acima, equação (3.31), é o **primeiro resultado original do nosso trabalho**, isto é, a solução exata para o sistema composto por uma partícula eletricamente carregada, com uma massa efetiva dependente da posição dada por (3.2) e interagindo com um monopolo magnético na origem, no regime não-relativístico.

3.2 Mapeamento aproximado

Nesta seção investigaremos as funções radiais (3.31). Vamos utilizar essas funções para criar duas outras classes distintas de funções. A primeira classe conterá funções que descrevem sistemas que possuem uma massa efetiva dependente da posição, porém na ausência de um monopolo magnético e a segunda classe conterá funções que descrevem sistemas que possuem uma massa efetiva constante, mas na presença de um monopolo magnético localizado na origem. As funções pertencentes à primeira classe serão nomeadas como G(r), e as funções pertencentes à segunda classe serão nomeadas como H(r). A principal ideia aqui é fazer uma correspondência biunívoca entre esses dois conjuntos distintos de funções radiais. O objetivo final então é reproduzir um sistema composto por uma partícula eletricamente carregada, interagindo com um monopolo magnético localizado na origem usando outro sistema físico (sistema análogo), que neste caso é o nosso sistema quântico PDM.

Primeiro vamos construir nossas funções G(r) usando a função radial (3.31), nós então estabelecemos que, neste caso, devemos ter $\mu = 0$ e $w \neq 0$. Então, nossa função para uma partícula carregada, com massa efetiva dependente da posição, porém na ausência de monopolo magnético é,

$$G(r) = r^{\frac{w-1}{2}} J_{\ell+1/2}(k'r^{1+w/2}), \qquad (3.34)$$

onde a ordem da Bessel é dada pela seguinte expressão,

$$\ell + 1/2 = \frac{(1+2l)}{2+w},\tag{3.35}$$

agora vamos construir as nossas funções H(r) para uma partícula de massa constante, mas na presença de um monopolo magnético. Estabelecendo então que w = 0 e $\mu \neq 0$, obtemos,

$$H(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\ell+1/2}(kr), \qquad (3.36)$$

onde agora a ordem da Bessel é dada pela seguinte expressão,

$$\ell + 1/2 = \frac{\sqrt{(1+2l)^2 - 4\mu^2}}{2},\tag{3.37}$$

esta última função H(r) é simplesmente a nossa função de onda radial de Wu-Yang, dada em (3.32). Neste ponto gostaríamos de verificar se existe algum intervalo em que essas funções correspondam, então vamos impor que a ordem da Bessel $\ell + 1/2$ seja exatamente igual em ambas as funções G(r)e H(r), ou seja,

$$\frac{(1+2l)}{2+w} = \frac{\sqrt{(1+2l)^2 - 4\mu^2}}{2},$$
(3.38)

isolando o expoente w nessa expressão e pondo o mesmo em função de l e n, obtemos a seguinte relação,

$$w = \frac{2(1+2l)}{\sqrt{(1+2l)^2 - n^2}} - 2,$$
(3.39)

onde usamos a condição de quantização de Dirac $\mu = eg = n/2 \text{ com } n \in \mathbb{Z}$. Assim, esta expressão nos fornece uma relação importante entre $w, l \in n$. Um conjunto de valores que satisfaz essa expressão nos permitiria construir um sistema quântico PDM análogo a um outro sistema, composto por uma partícula carregada na presença de um monopolo magnético. Sabemos que os números quânticos $l \in n$ devem ser números inteiros, então para que possamos descobrir o valor do expoente w para um determinado valor de $l \in n$, vamos escolher o conjunto particular (n, l) = (1, 1). Colocando estes valores na relação (3.39) obtemos o seguinte valor aproximado para w,

$$w \simeq 0,12132$$
 (3.40)

uma pergunta que surge é: existem outros valores de $l \in n$ fornecendo este mesmo w? A resposta é afirmativa! Há uma quantidade infinita de pares (n, l) que satisfaz esta condição. Um valor adequado para w a partir de agora será rotulado como w(p, q), onde p está associado a um valor inicial escolhido de $n \in q$ está associado a um valor inicial escolhido de $l \mod q > (p-1)/2$. Prosseguindo com a nossa nova nomenclatura, o último caso é reescrito então como,

$$w(p,q) = w(1,1) \simeq 0,12132$$
 (3.41)

esse valor pode ser obtido pela relação (3.39). Assim, fixando um determinado valor inicial (p,q), qualquer par (n,l) associado a ele e fornecendo o mesmo valor de w pode ser dado em função de p e q por meio da seguinte expressão,

$$(n,l)_k = \left([2^p k + p], \frac{2^p k + p}{2p} [2q+1] - \frac{1}{2} \right), \qquad (3.42)$$

onde $k \in \mathbb{N}$ é definido como a ordem do par. A ordem zero k = 0 está relacionada com o menor valor de $l \in n$, ou em outras palavras, é o par $(n,l)_0 = (p,q)$. Aqui é conveniente comentar que, para um valor fixo de p, quanto maior for o q, menor será o valor de w(p,q). Neste caso, podemos encontrar o seguinte limite,

$$\lim_{q \to \infty} w(p,q) = 0, \tag{3.43}$$

podemos observar que quanto mais o valor de w(p,q) se aproxima de zero, mais o comportamento de monopolo magnético é suprimido, ou seja, $G_{pq}(r) \approx$ $H_{p,q}(r) = j_{\ell+1/2}(kr)$. Desta forma, podemos somente selecionar alguns valores de w(p,q), escolhidos corretamente, de modo que será o maior para um determinado valor fixo de p. Portanto, nos limitaremos a usar valores dentro do seguinte intervalo,

$$\frac{p-1}{2} < q < \frac{p+5}{2},\tag{3.44}$$

com $q \in \mathbb{Z}$. Agora, vamos escolher alguns valores de w(p,q), obedecendo a última relação, e usá-los para escrever as funções $G_{pq}(r)$ e $H_{pq}(r)$. Os resultados estão resumidos na tabela 3.1.

Para ilustrar o mapeamento aproximado, vamos escolher o conjunto w(p,q)= w(1,1). Os gráficos das funções radiais $G(r) \in H(r)$ correspondentes,

$$G_{11}(r) = r^{-0.43} J_{\sqrt{2}}(k' r^{1.06}), \qquad \qquad H_{11}(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\sqrt{2}}(kr), \qquad (3.45)$$

são comparados na Fig. 3.1, onde a curva amarela representa $G_{11}(r)$ e a curva azul, $H_{11}(r)$. Podemos ver que ambos os gráficos coincidem aproximadamente no intervalo 0 < r < 5. Entretanto, fora deste intervalo, os gráficos não coincidem e não podemos ter mais uma correspondência entre os sistemas representados por eles. Por esta razão, tal mapeamento é somente aproximado. Na Fig. 3.2 temos a curva representando o potencial efetivo dado pela

w(p,q)	k'	$G_{pq}(r)$	$H_{pq}(r)$
$w(1,1) \approx 0,12132$	$k' \approx 0,9428k$	$G_{11}(r) = r^{-0,43} J_{\sqrt{2}}(k'r^{1,06})$	$H_{11}(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\sqrt{2}}(kr)$
$w(2,2) \approx 0,18218$	$k'\approx 0,9165k$	$G_{22}(r) = r^{-0,40} J_{\sqrt{21}}(k'r^{1,09})$	$H_{22}(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\sqrt{21}}(kr)$
$w(2,3) \approx 0,08699$	$k'\approx 0,9583k$	$G_{23}(r) = r^{-0.45} J_{\sqrt{45}/2}(k'r^{1.04})$	$H_{23}(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\sqrt{45}/2}(kr)$
$w(3,2) \approx 0,5$	k' = 0,8000k	$G_{32}(r) = r^{-0,25} J_2(k' r^{1,25})$	$H_{32}(r) = r^{-\frac{1}{2}}J_2(kr)$
$w(3,3) \approx 0,21359$	$k' \approx 0,9035k$	$G_{33}(r) = r^{-0,39} J_{\sqrt{10}}(k'r^{1,10})$	$H_{33}(r) = r^{-\frac{1}{2}} J_{\sqrt{10}}(kr)$

Tabela 3.1: Tabela de parâmetros w, $p \in q$ que produzem um mapeamento aproximado entre um sistema carga-monopolo de massa constante e um sistema quântico PDM carregado. O mapeamento é apenas aproximado, porque as funções de onda radiais correspondem somente em um determinado intervalo $r_a \leq r \leq r_b$. Na Fig. 3.1 mostramos um desses mapeamentos aproximados em que $r_a = 0$ e $r_b = 5$.

expressão (3.16) para o mesmo conjunto w(1,1). Este potencial efetivo representa o nosso modelo análogo para o mapeamento aproximado do sistema alvo carga-monopolo.

3.3 Mapeamento exato

Na seção anterior investigamos se a função de onda radial para uma partícula escalar carregada com massa efetiva dependente da posição poderia coincidir com a função de onda radial da mesma partícula, porém com massa constante e na presença de um monopolo magnético. Verificamos que ambas são funções de Bessel, mas suas ordens e argumentos são distintos. Nossos cálculos mostraram que esse mapeamento é apenas aproximado, pois pode ser alcançado somente para alguns valores especiais de w e para um determi-



Figura 3.1: Ilustração do mapeamento aproximado entre as funções de onda radiais de um sistema carga-monopolo com massa constante e carga PDM sem monopolo. Aqui apresentamos G_{11} (amarelo) e H_{11} (azul) e observamos que a aproximação é boa para 0 < r < 5.



Figura 3.2: Curva do potencial efetivo associado ao valor w(1, 1). Usamos $\mu = 1/2 \ (n = 1)$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

nado intervalo da coordenada r. Portanto nosso questionamento permanece: é possível reproduzir exatamente a função de onda de uma partícula carregada na presença de um monopolo magnético utilizando sistemas quânticos PDM? Para realizar isto, precisamos conhecer exatamente a função de onda ψ de uma partícula eletricamente carregada, de massa constante m_0 , na presença de um monopolo magnético (sistema alvo); Neste caso a função de onda ψ é uma função de Bessel esférica multiplicada por um harmônico esférico generalizado $Y_{\mu lm}$ (para mais detalhes sobre esta solução, consultar o apêndice B). Esta função de onda ψ é conhecida como função de onda de Wu-Yang ψ_{WY} para o sistema carga-monopolo. Desta forma, temos uma ideia de como construir um modelo análogo a um sistema carga-monopolo utilizando sistemas quânticos PDM. Na próxima seção daremos início à construção este modelo.

3.3.1 Equação diferencial parcial não-linear para a massa

A abordagem para atingir este objetivo é bastante direta! Vamos perguntar diretamente à própria equação de Schrödinger livre PDM: qual seria a forma funcional da distribuição de massa $M = M(r, \theta, \phi)$ que poderia produzir tal função de onda? Obteremos neste caso não uma EDP para $\psi(r, \theta, \phi)$, mas uma EDP para $M = M(r, \theta, \phi)$ e essa distribuição M agora poderá depender de mais de uma variável. A função de onda exata de Wu-Yang $\psi_{WY}(r, \theta, \phi)$ para o sistema composto por uma partícula carregada na presença de um monopolo pode ser escrita como,

$$\psi_{WY}(r,\theta,\phi) = F_{\ell}(r)Y_{\mu lm}(\theta,\phi), \qquad (3.46)$$

onde $F_{\ell}(r)$ é a parte radial e $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$ é o harmônico de monopolo (3.22). Substituindo esta função de onda na equação de Schrödinger livre PDM (2.21), isto é,

$$-\frac{1}{M}\nabla^2\psi_{WY} + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi_{WY} + U_{eff}\psi_{WY} = E\psi_{WY},\qquad(3.47)$$

relembrando que utilizaremos a parametrização de Zhu-Kroemer e, consequentemente, o potencial efetivo U_{eff} dado por (2.23). Considerando então o Laplaciano e o gradiente em coordenadas esféricas e multiplicando ambos os lados pela distribuição de massa M, podemos escrever a equação (3.47) em uma forma mais explícita,

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_{WY}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_{WY}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_{WY}}{\partial^2 \phi} \right\} \\
+ \frac{1}{M} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi_{WY} + \left(\frac{1}{2M} \nabla^2 M - \frac{3}{4M^2} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M \right) \psi_{WY} \\
= M E \psi_{WY},$$
(3.48)

as derivadas angulares na expressão anterior podem ser substituídas, se for utilizada a seguinte relação [34],

$$-\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\phi}\right\}Y_{\mu lm} = \left[l(l+1) - \mu^2 - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right]Y_{\mu lm},$$
(3.49)

substituindo o resultado anterior em (3.48) obtêm-se,

$$Y_{\mu lm}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)F_{\ell} + \frac{F_{\ell}}{r^2}\left[l(l+1) - \mu^2 - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right]Y_{\mu lm} + \left(\frac{1}{M}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla} + \frac{1}{2M}\nabla^2M - \frac{3}{4M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)F_{\ell}Y_{\mu lm} = MEF_{\ell}Y_{\mu lm}, \qquad (3.50)$$

os primeiros quatro termos podem ser substituídos por $2m_0 E F_\ell Y_{\mu lm}$, já que a parte radial obedece a uma equação de Bessel esférica, isto é,

$$-Y_{\mu lm}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)F_{\ell} + \frac{l(l+1)F_{\ell}Y_{\mu lm}}{r^2} - \frac{\mu^2 F_{\ell}Y_{\mu lm}}{r^2} = 2m_0 EF_{\ell}Y_{\mu lm}, \quad (3.51)$$

onde m_0 é a massa constante da partícula interagindo com o monopolo na origem (sistema alvo). Utilizando a expressão para o harmônico esférico de monopolo (3.22), podemos facilmente determinar a derivada em relação ao ângulo azimutal ϕ . O resultado pode ser escrito como,

$$-i\frac{\partial Y_{\mu lm}}{\partial \phi} = (m+\mu)Y_{\mu lm}, \qquad (3.52)$$

utilizando esta equação angular para ϕ e a expressão (3.51), chegamos à seguinte equação diferencial parcial (EDP) não-linear para a distribuição de massa M,

$$\left[2m_{0}E + \frac{2\mu(m+\mu)(1-\cos\theta)}{r^{2}\sin^{2}\theta} - \frac{\mu^{2}(1-\cos\theta)^{2}}{r^{2}\sin^{2}\theta} + \frac{1}{M}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla} + \frac{1}{2M}\nabla^{2}M - \frac{3}{4M^{2}}(\vec{\nabla}M)^{2}\right]F_{\ell}Y_{\mu lm} = MEF_{\ell}Y_{\mu lm},$$
(3.53)

a fim de investigar se existe uma solução, pode-se simplificar a equação acima tomando a simetria azimutal, isto é, considerando simplesmente,

$$m + \mu = 0, \tag{3.54}$$

consequentemente, passamos a considerar o caso especial em que $M = M(r, \theta)$. Assim, considerando esta simetria, multiplicando todos termos por 2M e cancelando o produto $F_{\ell}Y_{\mu lm}$, obtemos,

$$\nabla^2 M - \frac{3(\vec{\nabla}M)^2}{2M} + \frac{2}{\psi_{WY}} \vec{\nabla}M \cdot \vec{\nabla}\psi_{WY} - \frac{2\mu^2 (1 - \cos\theta)^2}{r^2 \sin^2\theta} M = 2M(M - 2m_0)E,$$
(3.55)

colocando as expressões para o Laplaciano e o gradiente em coordenadas esféricas, obtemos finalmente,

$$\frac{\partial^2 M}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial M}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 M}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{r^2} \frac{\partial M}{\partial \theta} - \frac{3}{2M} \left[\left(\frac{\partial M}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial M}{\partial \theta} \right)^2 \right] \\ + \frac{2}{F_\ell} \frac{\partial F_\ell}{\partial r} \frac{\partial M}{\partial r} + \frac{2}{r^2 Y_{\mu lm}} \frac{\partial Y_{\mu lm}}{\partial \theta} \frac{\partial M}{\partial \theta} - \frac{2\mu^2 (1 - \cos \theta)^2 M}{r^2 \sin^2 \theta} \\ = 2M (M - 2m_0) E, \tag{3.56}$$

que é a forma final da nossa equação diferencial parcial (EDP) não-linear para o mapeamento exato do sistema carga-monopolo. As soluções desta EDP não-linear **representam o nosso modelo análogo**.

3.3.2 Soluções numéricas

Pode-se observar claramente que a EDP (3.56) não é separável devido ao termo não - linear M^2 no lado direito. A primeira abordagem que poderiase fazer para lidar com esta equação seria descartar o termo M^2 e usar o ansatz $M(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$. Então, obteríamos duas equações não-lineares: a radial que também conteria uma não-linearidade em R(r), bem como um termo complicado envolvendo a função de Bessel e sua primeira derivada; E a equação angular, que seria tão complicada quanto a radial, já que teria tanto o monopolo harmônico quanto a sua derivada primeira. Assim, nas próximas duas subseções deste capítulo, utilizaremos um artifício para simplificar o problema e tentar obter soluções da EDP (3.56), as quais representam o nosso modelo análogo de um sistema carga-monopolo. De qualquer forma, devido a complexidade e não-linearidade de (3.56), teremos que fazer uso do cálculo numérico na busca das soluções, utilizando para esta tarefa o software Mathematica.

Para definir as condições iniciais e de contorno fisicamente razoáveis, vamos relembrar as propriedades clássicas [34] do sistema carga-monopolo: (i) o momento angular total é a soma de duas contribuições: momento angular orbital mais momento angular intrínseco magnético próprio de sistemas com monopolo; e (ii) quando a carga se move em direção ao monopolo, ela faz ao longo da superfície de um cone, atinge uma distância mínima e depois vai para o infinito. Considerando esses elementos clássicos, precisamos, em primeiro lugar, considerar alguns autovalores de energia, uma vez que a EDP que foi originada por um problema de autovalor — será satisfeita para determinados autovalores de E (como não temos um estado ligado neste sistema, o espectro de autovalores de energia será contínuo).

Vamos procurar por soluções com baixo valor de momento angular: como $m + \mu = 0$, podemos fixar $\mu = l = -m = 1$, então o polinômio de Jacobi simplifica para $P_0^{(a,b)}(x) = 1$.

Caso particular - dependência angular

Em primeiro lugar, vamos considerar o caso em que a massa depende apenas da coordenada angular θ , ou seja, $M = M(\theta)$ e também será considerado o caso linearizado, isto é, $M^2 \rightarrow 0$. Sob essas condições, a equação (3.56) torna-se então,

$$\frac{d^2M}{d\theta^2} + \cot\theta \frac{dM}{d\theta} - \frac{3}{2M} \left(\frac{dM}{d\theta}\right)^2 + \frac{2}{Y_{\mu lm}} \frac{dY_{\mu lm}}{d\theta} \frac{dM}{d\theta} - \frac{2\mu^2 (1 - \cos\theta)^2 M}{\sin^2\theta} + 4M m_0 r_0^2 E = 0, \qquad (3.57)$$

onde devemos fixar uma dada distância radial constante r_0 (a coordenada radial agora representa um parâmetro constante na EDO). Nesta subseção, consideraremos sempre que $r_0 = 1$ e fixaremos a massa da partícula no sistema alvo (carga-monopolo) como $m_0 = m_e = 1$. Apresentaremos duas soluções numéricas desta equação: a primeira é uma solução de um problema de valor de contorno de dois pontos, a saber, $M(0) = M(\pi) = 1$, apresentamos graficamente as soluções na Fig. 3.3 para quatro autovalores de energia. Observamos que a distribuição de massa tem uma variação suave para ângulos polares entre $0 \le \theta \le \pi/4$, então ela tende a zero e perto de $\theta = \pi$ aumenta abruptamente.

Podemos interpretar a situação, ver por exemplo [17], da seguinte maneira: é mais fácil para a partícula se propagar ao longo da região com menor massa e, inversamente, sofre uma inércia maior quando o ângulo polar é menor que $\pi/4$. O potencial efetivo aqui é dado pela equação (2.23) veja por exemplo a referência [68] equação (2.3) — apresentamos a solução para quatro autovalores de energia, representados na Fig. 3.4. Tal potencial efetivo é aquele que a partícula escalar carregada experimenta quando interage com um "background" com massa efetiva dependente da posição.

Considerando um problema de valor inicial padrão, a saber, M(0) = 1, M'(0) = 0 resolvemos facilmente a EDO e apresentamos o resultado na Fig. 3.5. Mais uma vez, observamos a função de massa diminuindo suavemente da unidade até que o ângulo polar se aproxime de $\pi/4$, então a massa efetiva tende a zero e perto de $\theta = \pi$ aumenta abruptamente. O potencial



Figura 3.3: Soluções numéricas da equação angular (3.57). As condições de contorno são $M(0) = M(\pi) = 1$ e foram apresentadas quatro curvas para diferentes autovalores de energia. Usamos $r_0 = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

efetivo pode ser calculado usando a mesma expressão e apresentamos os resultados na Fig. 3.6. Agora tem apenas uma assíntota vertical em $\theta = \pi$. Ambos os potenciais efetivos possuem um mínimo local.

Caso particular - dependência radial

Agora vamos considerar que a massa depende apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r). Precisamos escolher um valor específico de θ , digamos θ_0 , para resolver a EDO. A equação (3.56) assume a forma,

$$\frac{d^2M}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dM}{dr} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{dr}\right)^2 + \frac{2}{F_\ell}\frac{dF_\ell}{dr}\frac{dM}{dr} - \frac{2\mu^2(1-\cos\theta_0)^2M}{r^2\sin^2\theta_0} = 2M(M-2m_0)E,$$
(3.58)



Figura 3.4: Curvas do potencial efetivo determinadas a partir das soluções numéricas da equação angular (3.57), onde as condições de contorno são $M(0) = M(\pi) = 1$. Observe que há duas assíntotas verticais em $\theta = 0$ e $\theta = \pi$. Usamos $\mu = l = 1$, $r_0 = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.5: Soluções numéricas da equação angular (3.57) usando as condições iniciais M(0) = 1 e M'(0) = 0. Usamos $\mu = l = 1$, $r_0 = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.6: Curvas do potencial efetivo determinadas a partir das soluções numéricas da equação (3.57), com as mesmas condições iniciais (veja Fig. 3.5). Observe que há também uma assíntota vertical em $\theta = \pi$. Usamos $\mu = l = 1, r_0 = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

vamos escolher as condições de contorno $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$ e vamos fixar o valor de $\theta_0 = \pi/4$. Da mesma forma que no caso anterior, a massa da partícula no sistema alvo — carga-monopolo — será $m_0 = m_e = 1$. As distribuições de massa M, que são as soluções da equação radial (3.58), são apresentadas na Fig. 3.7 para alguns autovalores baixos de energia. As soluções radiais para outros autovalores mais altos de energia são mostradas na Fig. 3.9. Repare que a medida que o autovalor de energia se torna maior, o gráfico da solução radial passa a ter um máximo local cada vez mais acentuado.

Uma característica dos sistemas clássicos é que uma partícula carregada, quando se aproxima de um monopolo magnético estático colocado na origem, se move ao longo da superfície de um cone circular reto; Quando está longe da origem, sua trajetória é uma linha reta e, próxima ao vértice do cone,



Figura 3.7: Soluções numéricas da equação radial (3.58). As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$ e fixando $\theta_0 = \pi/4$. Tão perto quanto se aproxima da origem - onde o monopolo está localizado - a solução diverge. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

a carga segue uma trajetória espiral e depois é lançada ao infinito, isto é, a partícula atinge uma distância mínima do monopolo que está na origem (parâmetro de impacto) e logo se afasta. Essa característica também ocorre na mecânica quântica quando resolvemos numericamente a EDO. Quando tentamos resolver a EDO levando r_i muito próximo — por exemplo $r_i < 0.25$ — à origem, as soluções tendem ao infinito (divergem), em outras palavras, a partícula não alcança esta região. Os potenciais efetivos correspondentes às soluções radiais apresentadas na Fig. 3.7 são apresentados na Fig. 3.8 e para este caso, não existe um mínimo local. Os potenciais efetivos correspondentes às soluções radiais apresentadas na Fig. 3.9 possuem um máximo local e uma curvatura negativa cada vez mais acentuada com o aumento dos autovalores de energia.



Figura 3.8: Potenciais efetivos calculados usando a solução mostrada na Fig. 3.7 com $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $\theta_0 = \pi/4$, $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

Outra possibilidade interessante é procurar soluções radiais (distribuições de massa M) quando θ_0 varia dentro de um dado intervalo. Então considerando $\mu = l = 1$ e impondo $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0.35$ e $r_f = 1$, obtemos um problema conhecido como problema de valores de contorno de dois pontos. É uma tarefa relativamente simples resolvê-lo usando o software Mathematica. O resultado é apresentado na Fig. 3.9 e observamos que M varia suavemente no intervalo considerado. Os respectivos potenciais efetivos, mostrados na figura 3.12, não possuem um mínimo local.

Uma outra forma de apresentar as soluções radiais da EDO (3.25), que são as distribuições de massa M que de fato representam (juntamente com o potencial efetivo U_{eff}) o nosso modelo análogo do sistema carga-monopolo (sistema alvo), é considerando a superfície de um tronco de cone, onde o valor da massa efetiva do sistema quântico PDM é dado em uma escala de cores. Como um exemplo, vamos considerar uma distribuição de massa M, com



Figura 3.9: Soluções numéricas da equação (3.58) para alguns autovalores crescentes de energia. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) =$ $M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Aqui fixamos o valor $\theta_0 = \pi/4$. Tão perto quanto se aproxima da origem - onde o monopolo está localizado - a solução diverge. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.10: Potenciais efetivos calculados usando a solução mostrada na Fig. 3.9 com $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Aqui fixamos o valor $\theta_0 = \pi/4$. Usamos $\mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.11: Soluções numéricas da equação (3.58) para diversos valores de θ_0 variando de 40° a 100°. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Usamos $E = \mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.12: Potenciais efetivos determinados a partir das soluções radiais da equação (3.58) para diversos valores de θ_0 variando de 40° a 100°. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Usamos $E = \mu = l = 1$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 3.13: Solução numérica da equação (3.58) utilizando agora um tronco de cone, onde o valor para a massa efetiva é dado pela escala de cores. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Tão perto quanto se aproxima da origem - onde o monopolo está localizado - a solução diverge. Usamos $\mu = -m = l = 1, \theta_0 = \pi/4, E = 0,20$ e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

condições de contorno M(r) tal que $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0,35$ e $r_f = 1$. Vamos considerar $\mu = -m = l = 1$, E = 0,20 e vamos fixar o valor de $\theta_0 = \pi/4$. Esta solução radial é então apresentada na Fig. 3.13. Em suma, os resultados apresentados nas Fig. 3.3 - 3.13 representam o nosso modelo análogo do sistema alvo carga-monopolo, considerando o mapeamento exato.

3.4 Conclusão

Neste capítulo, investigamos inicialmente o sistema carga-monopolo nãorelativístico em um contexto envolvendo uma massa efetiva dependente de posição dada por (3.2). A parte angular é a mesma do sistema cargamonopolo com massa constante, a qual envolve os harmônicos de monopolo $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$, entretanto a diferença surgiu na parte radial. Resolvemos a parte radial do problema e obtemos a solução exata F(r), de onde criamos duas outras classes de funções: uma associada a sistemas carga-monopolo com massa constante H(r) e outra associada a partícula com massa variável na ausência de um monopolo G(r). Impomos que a ordem dessas funções fosse a mesma, o que nos deu uma importante relação entre $n, l \in w$. Assim, escolhendo um conjunto de valores (n, l), obtemos w, o qual nos dá uma distribuição de massa M e um potencial efetivo U_{eff} , que tornam as funções de onda aproximadamente iguais em um intervalo de r. O mapeamento construído desta forma é aproximado e o resultado para um conjunto particular de (n, l) = (1, 1) foi apresentado na Fig. 3.1.

Finalmente perguntamos à equação de Schrödinger PDM qual distribuição de massa M poderia reproduzir exatamente as funções de onda de Wu-Yang para o sistema carga-monopolo. Substituindo então esta função de onda na equação de Schrödinger livre PDM, conseguimos chegar a uma EDP para M. Esta EDP é não-linear e consideramos separadamente uma dependência angular e uma radial. Tal suposição deu origem a duas EDO não-lineares, as quais foram resolvidas numericamente. As soluções destas EDO e os potenciais efetivos foram apresentados graficamente e **representam o nosso modelo análogo do sistema alvo carga-monopolo**. Ilustramos nossos resultados nas figuras 3.3 - 3.13. O conteúdo deste capítulo foi publicado na referência [73].
Capítulo 4

Mapeamento entre o sistema carga-dyon e sistemas com massa efetiva dependente da posição

Neste capítulo construiremos o mapeamento exato entre o sistema carga-dyon (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo), nos regimes não-relativístico e relativístico. No primeiro caso substituiremos a solução exata do sistema alvo na equação de Schrödinger PDM para obter uma EDP não-linear para a distribuição de massa M. Considerando apenas uma dependência radial, obtemos uma EDO que será resolvida numericamente e cujas soluções serão apresentadas graficamente. O mapeamento para o caso relativístico será semelhante, porém ao invés de usar a equação de Schrödinger, usaremos a equação de Klein-Gordon PDM.

4.1 Introdução

Dyons são partículas possuindo simultaneamente carga elétrica e magnética e foram introduzidos inicialmente em 1969 por J. Schwinger [48] como uma alternativa fenomenológica para o modelo dos quarks. Desta forma, no modelo proposto por Schwinger, hádrons seriam então compostos por dyons, os quais teriam carga elétrica e magnética fracionárias. Um bóson vetorial intermediário chamado bóson S, tendo uma carga magnética unitária, foi postulado para mediar o processo de troca de carga nestes dyons, exatamente da mesma forma como ocorre com a interação fraca. Um trabalho interessante sobre os dyons envolvendo soluções exatas no regime relativístico pode ser encontrado em [69].

Um outro aspecto interessante é que um sistema composto por dois dyons (chamaremos dyon 1 e dyon 2) possui uma relação de quantização semelhante à relação de quantização de Dirac para os monopolos magnéticos (3.1). No caso envolvendo dyons, esta relação é chamada relação de quantização de Schwinger. Tal relação é escrita como,

$$e_1g_2 - e_2g_1 = \frac{n}{2}, \qquad n \in \mathbb{Z},$$
 (4.1)

onde e_1, g_1 são as cargas elétrica e magnética, respectivamente, do dyon 1 e e_2, g_2 são as correspondentes cargas do dyon 2. Pode-se verificar facilmente que se considerarmos a carga magnética de um dos dyons igual a zero, recuperamos a relação de quantização de Dirac (3.1).

Iniciaremos este capítulo com a construção do mapeamento exato de um sistema quântico composto por uma partícula escalar, não-relativística e com carga elétrica e, interagindo com um dyon com carga elétrica Q e magnética g, o qual abreviaremos simplesmente como sistema carga-dyon (sistema alvo) em um sistema quântico PDM (modelo análogo). Consideraremos neste tra-

balho somente estados ligados. Assim, as cargas $e \in Q$ terão sempre sinais opostos, isto é, eQ < 0. Para determinar a distribuição de massa M, que por sua vez também pode ser interpretada como um potencial efetivo U_{eff} que reproduz exatamente as autofunções e os autovalores de energia do sistema alvo carga-dyon, procedemos como no caso carga-monopolo; Então, substituímos as autofunções exatas e os autovalores de energia do sistema carga-dyon na equação de Schrödinger livre PDM e resolvemos não para a função de onda ψ , mas para a distribuição de massa M. No caso não-relativístico, o Hamiltoniano cinético será o mesmo visto no caso carga-monopolo e usaremos novamente a parametrização de Zhu-Kroemer [5] que é, relembrando, uma das parametrizações fisicamente admissíveis segundo o critério de Dutra e Almeida [4]. A equação diferencial para a distribuição de massa M torna-se, da mesma forma que no caso carga-monopolo, não-linear e procuramos soluções simples, numericamente, relacionadas a um problema de valores de contorno de dois pontos. O presente capítulo também tratará o mapeamento exato no caso relativístico, utilizando a equação de Klein-Gordon PDM. Uma solução analítica para a distribuição de massa poderá ser obtida e posteriormente será feita a análise considerando a construção de Wu-Yang para o monopolo magnético de Dirac.

4.2 Mapeamento exato

Nesta seção introduziremos formalmente o estudo do mapeamento exato e consequentemente a construção do nosso modelo análogo para o sistema carga-dyon. O modelo físico pode ser obtido, assim como no caso anterior, a partir de um problema simples de autovalor,

$$H_0\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta), \qquad (4.2)$$

onde o Hamiltoniano para a massa efetiva dependente da posição ainda é dado ainda pela expressão 2.18. Neste capítulo, também usaremos coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) e tanto no caso não-relativístico como no caso relativístico (seção 4.3) usaremos unidades naturais onde $\hbar = m_e = c = k_0 = 1$ e $e = \sqrt{\alpha}$. Para determinar o potencial efetivo U_{eff} para um sistema particular, precisamos conhecer a distribuição de massa M e também selecionar um dado ordenamento, que conforme foi dito, será o ordenamento de Zhu-Kroemer (ZK) em que $\alpha = \gamma = -1/2$ e $\beta = 0$. Esta escolha produz um potencial efetivo U_{eff} dado pela expressão (2.23).

A ideia principal é construir um mapeamento entre um sistema composto por uma partícula quântica, escalar e eletricamente carregada, interagindo com um dyon localizado na origem (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo). A fim de obter tal mapeamento, substituímos a função de onda exata do sistema de carga-dyon na equação de Schrödinger livre PDM e solucionamos para a massa. Assim, uma partícula escalar com massa dependente da posição, ou em outras palavras, uma partícula carregada de massa constante m_0 interagindo com o potencial efetivo — reproduz exatamente o comportamento do sistema alvo, que é o sistema carga-dyon.

As autofunções exatas de uma partícula escalar e carregada interagindo com um dyon são,

$$\psi_{dyon}(r,\theta,\phi) = F_{Nl}(r)Y_{\mu lm}(\theta,\phi), \qquad (4.3)$$

onde a parte angular ainda é dada pelos chamados harmônicos esféricos generalizados ou harmônicos de monopolo [33, 34], cuja expressão se encontra em (3.22) ou no apêndice B. Desta forma, a parte angular do sistema cargadyon é idêntica a do sistema carga-monopolo, entretanto as funções radiais normalizadas para o presente caso são,

$$F_{N\ell}(r) = \frac{2^{\ell+1} [m_0 e Q \Gamma(N+2\ell+2)]^{1/2}}{(N!)^{1/2} (N+\ell+1) \Gamma(2\ell+2)} (kr)^{\ell} e^{-kr} {}_1F_1(-N; 2\ell+2; 2kr), \quad (4.4)$$

onde $k^2 = -2m_0 E > 0$, a função ${}_1F_1$ é a conhecida função hipergeométrica confluente [34], N é um número quântico radial N = 0, 1, 2, ... e ℓ é relacionado ao número quântico angular l por,

$$\ell = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2} - \frac{1}{2}.$$
(4.5)

No sistema composto por uma partícula eletricamente carregada interagindo com um dyon, onde consideramos um estado ligado, isto é, eQ < 0, o espectro de energia é discreto. Os autovalores de energia são dados por,

$$E_{N\ell} = -\frac{m_0 (eQ)^2}{2(N+\ell+1)^2},\tag{4.6}$$

ou seja, estes são os autovalores de energia permitidos para o estado ligado composto por uma partícula eletricamente carregada interagindo com um campo dyônico estático.

4.2.1 Equação diferencial parcial para a massa

Substituindo a autofunção $\psi_{dyon}(r, \theta, \phi)$ na equação de Schrödinger livre PDM (2.21) com o potencial efetivo dado por (2.23) e utilizando o gradiente e o Laplaciano em coordenadas esféricas, obtemos,

$$-\left\{\frac{1}{r^{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial\psi_{dyon}}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^{2}\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_{dyon}}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^{2}\sin^{2}\theta}\frac{\partial^{2}\psi_{dyon}}{\partial^{2}\phi}\right\}$$
$$+\frac{1}{M}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi_{dyon}+\left(\frac{1}{2M}\nabla^{2}M-\frac{3}{4M^{2}}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)\psi_{dyon}$$
$$=ME_{N\ell}\psi_{dyon},\qquad(4.7)$$

para buscar uma equação diferencial para a distribuição de massa $M(r, \theta, \phi)$, vamos usar a seguinte propriedade das funções $Y_{\mu lm}$,

$$-\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\phi}\right\}Y_{\mu lm} = \left[l(l+1) - \mu^2 - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right]Y_{\mu lm},\tag{4.8}$$

substituindo o resultado acima na equação (4.7), obtemos,

$$-Y_{\mu lm}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)F_{N\ell} + \frac{F_{N\ell}}{r^2}\left[l(l+1) - \mu^2 - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right]Y_{\mu lm} + \left(\frac{1}{M}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla} + \frac{1}{2M}\nabla^2M - \frac{3}{4M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)F_{N\ell}Y_{\mu lm} = ME_{N\ell}F_{N\ell}Y_{\mu lm}, \tag{4.9}$$

usando a equação diferencial confluente, os primeiros quatro termos da equação anterior podem ser substituídos por,

$$-Y_{\mu lm}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)F_{N\ell} + \frac{l(l+1)F_{N\ell}Y_{\mu lm}}{r^2} - \frac{\mu^2 F_{N\ell}Y_{\mu lm}}{r^2} = \left(\frac{2m_0eQ}{r} + 2m_0E_{N\ell}\right)F_{N\ell}Y_{\mu lm},$$
(4.10)

onde o primeiro termo do lado direito é relacionado ao potencial Coulombiano. Conforme foi feito no capítulo anterior, podemos utilizar os harmônicos esféricos generalizados (3.22), que também são autofunções do operador L_z , para determinar a derivada em relação ao ângulo azimutal ϕ , o resultado é (relembrando),

$$-i\frac{\partial Y_{\mu lm}}{\partial \phi} = (m+\mu)Y_{\mu lm}, \qquad (4.11)$$

utilizando novamente esta equação e a expressão (4.10), obtemos uma EDP não-linear para a distribuição de massa M,

$$\left[2m_{0}E + \frac{2\mu(m+\mu)(1-\cos\theta)}{r^{2}\sin^{2}\theta} - \frac{\mu^{2}(1-\cos\theta)^{2}}{r^{2}\sin^{2}\theta} + \frac{1}{M}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla} + \frac{1}{2M}\nabla^{2}M + \frac{2m_{0}eQ}{r} - \frac{3}{4M^{2}}(\vec{\nabla}M)^{2}\right]F_{N\ell}Y_{\mu lm} = ME_{N\ell}F_{N\ell}Y_{\mu lm},$$
(4.12)

pretendemos investigar se existe uma solução para o nosso modelo, então vamos simplificar a equação considerando $m + \mu = 0$ exatamente como fizemos no caso do mapeamento carga-monopolo. Conforme foi visto, esta restrição introduz uma simetria azimutal ao sistema. Assim, considerando esta simetria, multiplicando todos os termos por 2M e cancelando o produto $F_{N\ell}Y_{\mu lm}$, a equação (4.7) torna-se então,

$$\nabla^2 M - \frac{3}{2} \frac{(\vec{\nabla} M)^2}{M} + \frac{4m_0 e Q M}{r} + \frac{2}{\psi_{dyon}} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi_{dyon} - \frac{2\mu^2 (1 - \cos\theta)^2 M}{r^2 \sin^2\theta}$$

= $2M(M - 2m_0) E_{N\ell},$ (4.13)

que é a equação de mapeamento exato para o sistema carga-dyon. Vamos consideraremos o caso especial onde a massa depende apenas da coordenada radial, consequentemente $\partial M/\partial \theta = 0$. Assim, utilizando o gradiente e o Laplaciano em coordenadas esféricas, obtemos a nossa EDO não-linear para a distribuição de massa M,

$$\frac{d^2M}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dM}{dr} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{dr}\right)^2 - \frac{4m_0eQM}{r} + \frac{2}{F_{N\ell}}\frac{dF_{N\ell}}{dr}\frac{dM}{dr} - \frac{2\mu^2(1-\cos\theta)^2M}{r^2\sin^2\theta} = 2M(M-2m_0)E_{N\ell}.$$
(4.14)

As soluções radiais desta equação serão as distribuições de massa M(r)representando o nosso modelo análogo para o sistema carga-dyon. Algumas semelhanças podem ser identificadas entre os mapeamentos para os sistemas carga-monopolo e carga-dyon, este último envolve funções hipergeométricas confluentes, bem como o produto eQ, que dá origem ao termo extra $4m_0eQM/r$ relacionado ao potencial elétrico Coulombiano. Convém comentar que ambos os modelos correspondem quando Q = 0. Uma das finalidades do presente capítulo é estender então a ideia desenvolvida no capítulo anterior para um sistema carga-dyon não-relativístico. Na próxima seção, a equação (4.14) será resolvida numericamente.

4.2.2 Soluções numéricas

Considerando que a massa depende apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r), precisamos obter um valor específico de θ , digamos θ_0 , para resolver a equação (4.14) numericamente. Vamos escolher as condições de contorno $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0.22$ e $r_f = 1$, e deixe $\theta_0 = \pi/4$. Também são procuradas soluções em que $m + \mu = 0$, portanto, tomemos $\mu = l = -m = 1$. Considerando o nosso sistema de unidades naturais com $e = \sqrt{\alpha}$, escolhendo $Q = -\sqrt{\alpha}/\alpha$ de forma que teremos eQ = -1 e fixando a massa da partícula do sistema alvo $m_0 = m_e = 1$, a equação (4.14) será numericamente resolvida pelo software Mathematica - este é um exemplo do chamado problema do valores de contorno de dois pontos - somente para certos valores de energia, dada pela expressão (4.6). A solução radial para o número quântico N = 2 é apresentada na Fig. 4.1. As soluções tendem ao infinito perto de r_i e não possuem um máximo local. O potencial efetivo correspondente a solução radial em é dado pela equação (2.23) e a curva para N = 2 é apresentada na Fig. 4.3. As soluções radiais também dependem de θ , esta dependência é apresentada na Fig. 4.2 com as mesmas condições de contorno e os mesmos parâmetros $\mu, l, m \in N$. Nesta figura, enumeramos alguns valores de θ entre 30° e 120° mostrando suas respectivas soluções radiais. Estas distribuições de massa M, que são as soluções radiais de (4.14), e seus respectivos potenciais efetivos U_{eff} representam o nosso modelo análogo do sistema alvo carga-dyon não-relativístico.



Figura 4.1: Solução numérica da equação (4.14) para N = 2, $\mu = l = 1$ e $\theta_0 = \pi/4$. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0.22$ e $r_f = 1$. À medida que nos aproximamos da origem, onde o dyon está localizado, a solução diverge.



Figura 4.2: Soluções numéricas de equação (4.14) para alguns valores de θ . Nestas soluções, consideramos $\mu = l = 1$ e N = 2. As condições de contorno são M(r) usando $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0.22$ e $r_f = 1$. Para θ entre 30° e 120°, temos um mínimo local.



Figura 4.3: Potencial efetivo determinado a partir da solução da equação (4.14) com $M(r_i) = M(r_f) = 1/2$ para $r_i = 0, 22$ e $r_f = 1$. Vamos fixar $\theta_0 = \pi/4$ e escolher N = 2. Os parâmetros são $\mu = l = -m = 1$.

4.3 Sistema carga-dyon relativístico - mapeamento exato via equação de Klein-Gordon

Nesta última parte do capítulo vamos realizar o mapeamento entre o sistema carga-dyon no regime relativístico (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo). Este mapeamento é realizado com o uso da equação de Klein-Gordon, que é uma equação relativística para partículas escalares. Precisamos derivar a equação de Klein-Gordon PDM e esta pode ser obtida da equação de Klein Gordon usual de maneira bastante direta, considerando simplesmente uma dependência espacial da massa. A equação de Klein-Gordon para massa constante é simplesmente,

$$(\Box^2 + m^2)\psi = 0, \tag{4.15}$$

assim como no tratamento não - relativístico, vamos utilizar as unidades naturais onde $\hbar = m_e = c = 1$ e $e = \sqrt{\alpha}$. O operador de d'Alembert é dado por,

$$\Box^2 = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \tag{4.16}$$

Vamos supor que a distribuição de massa é dependente das coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) , isto é, $m = m(r, \theta, \phi)$ e tomando o Laplaciano nestas coordenadas, obtemos a expressão para a equação de Klein-Gordon PDM,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + m^2(r, \theta, \phi) \end{bmatrix} \psi = 0, \tag{4.17}$$

seguindo a mesma ideia vista nos casos anteriores, precisamos da solução exata para o sistema relativístico carga-dyon com massa constante, via equação de Klein-Gordon. A solução pode ser obtida de [34] e diz,

$$\psi = \psi(r, \theta, \phi, t) = F_{N\ell}(r) Y_{\mu lm}(\theta, \phi) e^{-i\omega t}, \qquad (4.18)$$

onde ω é o autovalor de energia (será utilizada a parte discreta do espectro), $F_{N\ell}(r)$ é dado em (4.4) e $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos generalizados. Substituindo a solução exata acima na equação (4.17) obtemos,

$$m^{2}(r,\theta,\phi) = \omega^{2} + \frac{1}{F_{N\ell}} \frac{d^{2}F_{N\ell}}{dr^{2}} + \frac{2}{rF_{N\ell}} \frac{dF_{N\ell}}{dr} + \frac{1}{Y_{\mu lm}} \left[\frac{1}{r^{2}\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y_{\mu lm}}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{r^{2}\sin^{2}\theta} \frac{\partial^{2}Y_{\mu lm}}{\partial\phi^{2}} \right],$$

$$(4.19)$$

utilizando (3.21) e considerando a simetria azimutal $(m + \mu = 0)$ novamente, podemos obter a seguinte expressão,

$$m^{2}(r,\theta) = \omega^{2} + \frac{1}{F_{N\ell}} \frac{d^{2}F_{N\ell}}{dr^{2}} + \frac{2}{rF_{N\ell}} \frac{dF_{N\ell}}{dr} + \frac{[\mu^{2} - l(l+1)]}{r^{2}} + \frac{\mu^{2}(1 - \cos\theta)^{2}}{r^{2}\sin^{2}\theta},$$
(4.20)

a equação radial para o sistema carga -dyon relativístico via equação de Klein-Gordon pode ser obtida em [34] e tem a seguinte forma,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - k^2 + 2\omega\frac{eQ}{r} - \frac{[e^2Q^2 + l(l+1) - \mu^2]}{r^2}\right)F_{N\ell}(r) = 0, \quad (4.21)$$

usando esta equação para eliminar os termos envolvendo as derivadas de $F_{N\ell}(r)$ e usando também a relação relativística $k^2 = \omega^2 - m_0^2$ podemos obter uma expressão analítica para a distribuição de massa m do mapeamento exato entre o sistema carga-dyon e sistemas quânticos PDM, no regime relativístico. A distribuição de massa, que representa o nosso modelo análogo, é, ______

$$m(r,\theta) = \sqrt{2\omega^2 - m_0^2 - 2\omega\frac{eQ}{r} + \frac{e^2Q^2}{r^2} + \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{r^2\sin^2\theta}},$$
(4.22)

onde m_0 é a massa constante da partícula escalar que interage relativisticamente com o dyon localizado na origem. O que pretendemos fazer é reproduzir este cenário em um sistema quântico PDM, tendo em mente que não há nenhum dyon na origem, mas apenas uma partícula escalar carregada e relativística, que possui uma massa efetiva dependente da posição dada por (4.22). Repare que se considerarmos a carga elétrica Q e a magnética g do dyon iguais a zero, temos simplesmente $m(r, \theta) = m_0$. O espectro discreto de energia para este sistema ligado é dado pela seguinte expressão,

$$\omega = m_0 \sqrt{1 - \frac{e^2 Q^2}{e^2 Q^2 + (N + \ell + 1)^2}},$$
(4.23)

onde N = 0, 1, 2, ... é o número quântico para os níveis discretos de energia. A relação entre os números quânticos angulares $\ell \in l$ é,

$$\ell = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2 + 1} - \frac{1}{2}.$$
(4.24)

Resumindo, a distribuição de massa $m(r, \theta)$, que representa o modelo análogo para o sistema carga-dyon relativístico, possui uma expressão analítica dada por (4.22). Lembrando que estamos utilizando o sistema de unidades naturais com $e = \sqrt{\alpha}$, escolhendo $Q = -\sqrt{\alpha}/\alpha$ de forma que teremos eQ = -1 e fixando a massa da partícula do sistema alvo $m_0 = m_e = 1$, a solução é apresentada como uma superfície, que pode ser vista na Fig. 4.4. Para este mapeamento, ao contrário do que foi feito para os demais, não determinaremos o potencial efetivo U_{eff} associado com m. O caso relativístico foi mais simples porque o problema do ordenamento não ocorre, a principal razão para isto é a ausência do produto entre os operadores massa e momento (tal característica também ocorre na equação de Dirac). A não comutatividade entre esses operadores é que dá origem ao problema do ordenamento, que está presente no formalismo de Schrödinger.



Figura 4.4: Superfície representando a solução analítica (4.22) para $\mu = 1$, l = 0 N = 1 e eQ = -1 nos intervalos 0.2 < r < 1.0 e $0 < \theta < \pi$. Foram utilizadas as unidades naturais, onde $\hbar = m_0 = c = 1$.

4.3.1 Monopolo de Wu-Yang abeliano

Observando a expressão (3.17), podemos concluir que este potencial vetor não é definido em todos os pontos do espaço. Existe um conjunto de pontos, passando pela origem, que compõe a chamada corda de Dirac, assim seria mais adequado afirmar que não podemos considerar o potencial vetor de Dirac uma função, e sim uma distribuição. No caso da expressão (3.17), a corda de Dirac se encontra no semi-eixo z negativo, isto é, para o ângulo $\theta = \pi$. Uma maneira de se contornar a singularidade que aparece nesta teoria foi apresentada por T. T. Wu e C. N. Yang em 1975 [32, 33], utilizando elementos da geometria diferencial, da teoria das variedades diferenciáveis e dos espaços fibrados [34, 70].

A construção de Wu-Yang para o monopolo de Dirac abre mão da tradicional parametrização do espaço \mathbb{R}^2 , no qual o monopolo está situado, e propõe no lugar desta uma separação do ambiente em dois hemisférios, os quais chamaremos hemisférios norte N e sul S. Estes serão parametrizados por um conjunto particular de coordenadas, seguindo a ideia das coordenadas na chamada projeção estereográfica. Assim, o potencial vetor \vec{A} será dividido em duas expressões, uma definida para cada hemisfério, as quais chamaremos \vec{A}_N para o hemisfério norte e \vec{A}_S para o hemisfério sul. Em seus respectivos hemisférios, os potenciais não contém singularidades em seus domínios e na região do equador, os dois hemisférios possuem uma interseção ϵ . As expressões para os potenciais em cada hemisfério e seus respectivos domínios são dados por,

$$\begin{cases} \vec{A}_N = \frac{g}{r} \frac{(1-\cos\theta)}{r\sin\theta} \hat{e}_{\phi} & 0 \le \theta < \frac{\pi}{2} + \frac{\epsilon}{2} \\ \vec{A}_S = -\frac{g}{r} \frac{g(1+\cos\theta)}{r\sin\theta} \hat{e}_{\phi} & \frac{\pi}{2} - \frac{\epsilon}{2} < \theta \le \pi. \end{cases}$$
(4.25)

Na região de interseção $N \cap S$ ambos os potenciais são bem-definidos e

podemos conectá-los por uma transformação de calibre,

$$\vec{A}_N = \vec{A}_S - \frac{i}{e} \exp\left(-2ieg\phi\right) \vec{\nabla} \exp 2ieg\phi, \qquad (4.26)$$

onde e é a carga elétrica e g, a magnética. Assim, Wu e Yang compreenderam corretamente o problema da singularidade e apresentaram uma solução, introduzindo dois potenciais vetoriais relacionados por uma transformação de calibre. Desta forma, Wu e Yang eliminaram a corda de Dirac simplesmente redefinindo a parametrização do espaço em torno da carga magnética. O monopolo magnético com o potencial vetor \vec{A} dado pela construção de Wu-Yang (4.25) é chamado **monopolo magnético de Wu-Yang abeliano**, pois o grupo de simetria associado ainda é o grupo unitário U(1).

O dyon, devido a sua carga magnética g, compartilha do mesmo problema que o monopolo magnético de Dirac, isto é, o potencial vetor possui uma singularidade que dá origem a bem conhecida corda de Dirac [29], relembrando que a corda de Dirac do potencial vetor dado por (3.17) está localizada em $\theta = \pi$. Na Fig. 4.4 apresentamos a distribuição de massa que representa o modelo análogo do sistema carga-dyon relativístico, com a corda de Dirac localizada em $\theta = \pi$. Note que a massa efetiva aumenta quando θ se aproxima da corda (na verdade diverge para $\theta \to \pi$). Então, seguindo a construção de Wu-Yang, apresentamos a distribuição de massa na Fig. 4.5, ou seja, introduzimos um potencial vetor válido para $0 \le \theta < \pi/2 + \epsilon/2$ que tem uma singularidade em $\theta = \pi$ e outro potencial vetor válido para $\pi/2 - \epsilon/2 < \theta \le \pi$ e singular em $\theta = 0$. Ambos estão relacionados pela transformação de calibre (4.26).

A distribuição de massa na Fig. 4.5 foi dada novamente por (4.22), utilizando separadamente os termos $(1 - \cos \theta)^2$ e $(1 + \cos \theta)^2$, cada qual definido em um domínio livre de singularidades. Assim, uma partícula com massa efetiva dependente da posição dada por $m = m(r, \theta)$ é o **nosso mo**- delo análogo para o sistema carga-dyon relativístico, considerando também a construção de Wu-Yang. Este sistema PDM se comporta como se fosse uma partícula escalar, de massa constante m_0 , interagindo com um dyon localizado na origem, cujo potencial vetor associado com o campo magnético radial do monopolo é dado por (4.25).



Figura 4.5: Superfície representando a solução analítica (4.22) para $\mu = 1$, l = 0, N = 1 e eQ = -1, considerando agora a construção de Wu-Yang. Utilizamos os intervalos 0.2 < r < 1.0, $0 < \theta < \pi$ e as unidades naturais, onde $\hbar = m_0 = c = 1$.

Sistema	Carga-Dyon	Carga em um potencial externo
Massa	Constante	Dependente da posição $M(r)$ e $m(r, \theta)$
Função de onda	equações (4.3) e (4.18)	equações (4.3) e (4.18)
Autovalores de energia	$E_{N\ell} \in \omega$	$E_{N\ell} \in \omega$

Tabela 4.1: Sumário do mapeamento exato entre sistemas carga-dyon e sistemas quânticos PDM no regime não-relativístico e relativístico, respectivamente.

4.4 Conclusão

Neste capítulo realizamos um mapeamento exato entre o sistema carga-dyon (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo) nos regimes não-relativístico e relativístico. No primeiro caso substituímos a solução exata do sistema alvo na equação de Schrödinger livre PDM para obter a EDP não-linear para a distribuição de massa. Assim, considerando apenas uma dependência radial, obtemos uma EDO a qual resolvemos numericamente e apresentamos as soluções radiais juntamente com os potenciais efetivos correspondentes na forma de gráficos, que podem ser vistos nas Fig. 4.1 - 4.3. O tratamento para o caso relativístico é semelhante, porém ao invés de usar a equação de Schrödinger, usamos a equação de Klein-Gordon PDM. O problema do ordenamento não ocorre neste caso, pois temos a ausência do produto entre os operadores massa e momento. Assim, o mapeamento utilizando a equação de Klein-Gordon é mais direto e nos dá uma expressão analítica para a distribuição de massa $m(r, \theta)$. O gráfico desta solução foi apresentado na Fig. 4.4 e na Fig. 4.5 mostramos a mesma solução, porém incorporando a construção de Wu-Yang. Para o mapeamento via equação de Klein-Gordon PDM, entretanto, não determinamos os potenciais efetivos U_{eff} para as distribuições de massa m. Na tabela 4.1 apresentamos um resumo dos nossos resultados neste capítulo. Em suma, **nosso modelo análogo para o sistema alvo carga-dyon (não-relativístico e relativístico) é representado pelos gráficos nas Fig. 4.1 - 4.5**. O conteúdo deste capítulo foi publicado na referência [74].

Capítulo 5

Mapeamento entre o sistema carga-monopolo e sistemas com massa efetiva dependente da posição via equação de Pauli

Neste capítulo, consideraremos o sistema carga-monopolo não-relativístico com spin 1/2 e construiremos um mapeamento exato entre este sistema (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo). Utilizando então a equação de Pauli livre PDM, substituiremos a solução exata do sistema alvo nesta equação, obtendo um sistema desacoplado com duas EDP não-lineares para a distribuição de massa M. Trataremos somente o mapeamento para o caso onde os autovalores do operador \vec{J} iniciam do valor mínimo $j = \mu - 1/2$. Consideraremos apenas uma dependência radial e usaremos uma condição aproximada, que é necessária para que a solução das equações do sistema sejam aproximadamente iguais. Resolveremos as equações numericamente e apresentaremos as soluções graficamente.

5.1 Introdução

Conforme foi comentado no início do capítulo 3, monopolos magnéticos ainda não foram observados na natureza, entretanto este assunto ainda é explorado com bastante frequência pelos físicos e talvez seja um dos poucos casos na ciência em que um modelo teórico, relativamente antigo e sem qualquer evidência experimental, ainda consiga se manter como um campo de interesse. A física do monopolo magnético é frequentemente explorada em uma quantidade considerável de trabalhos, principalmente no campo das pesquisas experimentais, onde o monopolo magnético foi reproduzido em sistemas de gelo de spin [37, 38, 39] bem como, na criação de um par monopoloantimonopolo de Dirac em um condensado de Bose-Einstein com spin-1 [47], em campos quânticos [40], campos magnéticos sintéticos [41], usando metamateriais [43], entre outros. Historicamente, uma motivação para o estudo do monopolo magnético surgiu com P. Dirac em seu célebre trabalho [29] onde o mesmo explicou a quantização de carga elétrica devido à presença de monopolos magnéticos. Posteriormente, Wu e Yang investigaram o problema da singularidade no monopolo de Dirac e trabalharam uma técnica geométrica, relacionada com a teoria das variedades diferenciáveis e espaços fibrados [70], para eliminar a chamada corda de Dirac [32, 33]. 't Hooft e Polyakov introduziram os monopolos não-abelianos, os quais podem ser obtidos das equações de Yang-Mills [34, 35, 36].

Sistemas quânticos PDM utilizando a equação de Pauli foram investigados por nós há alguns anos atrás, considerando uma interação spin-órbita com os termos de Rashba e Dresselhaus [71]. Outro trabalho recentemente publicado por um dos autores foi sobre a solução para a equação de Pauli em uma superfície toroidal, com um campo magnético uniforme [72].

No presente trabalho fazemos uma outra contribuição para este assunto,

buscando por um sistema quântico PDM que possa modelar exatamente um sistema carga-monopolo não-relativístico, com spin 1/2 (férmion), via equação de Pauli livre PDM, isto é, buscamos um modelo análogo para este sistema (sistema alvo) utilizando sistemas quânticos PDM. Vamos prosseguir com a ideia principal dos capítulos anteriores, que é apresentar um modelo teórico para mapear um dado sistema quântico — não realizável experimentalmente no momento — em um sistema quântico PDM. Apresentamos nos capítulos anteriores dois exemplos de mapeamentos: um com o monopolo magnético de Dirac [73] e outro com o dyon [74]. A ideia de simular esse tipo de sistema — ou porque é irrealizável, veja por exemplo [75], ou porque é bastante difícil de reproduzir — usando um sistema controlado em matéria condensada — foi também explorado em vários trabalhos anteriores [76, 77, 78] usando técnicas ópticas.

Nossa técnica é a mesma vista nos capítulos anteriores, isto é, substituir a função de onda exata do sistema físico a ser investigado (sistema alvo) na equação de Pauli livre PDM e obter um sistema de equações diferenciais para a distribuição de massa. Se conseguirmos resolver esse sistema, então encontraremos a distribuição de massa efetiva - que por sua vez também pode ser relacionada com um potencial efetivo - que reproduz exatamente as autofunções de onda e os autovalores de energia do sistema alvo. Estas equações diferenciais serão não-lineares, como ocorreu nos casos anteriores, e recorreremos à técnicas numéricas para resolvê-las.

5.2 Equação de Pauli com massa efetiva dependente de posição - caso livre

A estrutura básica do nosso modelo pode ser obtida de maneira similar ao que foi feito nos capítulos anteriores. Considerando agora a equação de Pauli livre PDM, esta equação pode ser derivada de um simples problema de autovalor,

$$H_0\psi = E\psi,\tag{5.1}$$

onde H_0 é o Hamiltoniano cinético de von Roos (2.9) e E é um autovalor de energia. Aqui usaremos unidades naturais onde $\hbar = m_e = c = 1$ e $e = \sqrt{\alpha}$. Substituindo $\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}$ em H_0 , onde $\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}$ é o chamado vetor de Pauli, com as matrizes de Pauli σ_x, σ_y e σ_z sendo,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad (5.2)$$

e assumindo ψ como sendo um espinor de duas componentes ψ_+ e ψ_- , bem como utilizando propriedades operacionais das matrizes de Pauli, obtemos a equação de Pauli livre PDM,

$$\begin{pmatrix} H_0 & 0\\ 0 & H_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+\\ \psi_- \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_+\\ \psi_- \end{pmatrix}, \qquad (5.3)$$

a componente ψ_+ está relacionada ao spin up e ψ_- , ao spin down. Assim, temos duas equações desacopladas para cada componente do espinor ψ .

Para determinar o potencial efetivo U_{eff} para um sistema particular, precisamos, conforme já dito anteriormente, conhecer a distribuição de massa M e um determinado ordenamento. Neste capítulo usaremos novamente o ordenamento de Zhu-Kroemer [5] em que $\alpha = \gamma = -1/2$ e $\beta = 0$. Esta escolha produz o potencial efetivo U_{eff} visto em (2.23), este potencial efetivo será usado novamente na construção de nossa equação de mapeamento exato.

5.3 Mapeamento exato do sistema carga-monopolo em um sistema quântico PDM via equação livre de Pauli

O objetivo principal deste capítulo é a realização de um mapeamento exato entre um sistema composto por um férmion eletricamente carregado, de massa constante m_0 e spin 1/2, interagindo com um monopolo de Dirac (sistema alvo) e uma partícula carregada interagindo com um potencial efetivo associado a um "background"PDM (modelo análogo). A fim de obter tal mapeamento, substituímos a função de onda exata do sistema carga monopolo na equação de Pauli livre PDM (5.3) e resolvemos para a distribuição de massa M. Assim, a técnica nos permite apresentar um sistema quântico PDM, ou em outras palavras, uma partícula carregada interagindo com um dado potencial efetivo (modelo análogo), que reproduz exatamente o comportamento de um sistema carga-monopolo não-relativístico com spin.

De agora em diante em nossos cálculos usaremos apenas coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Considerando a equação de Pauli livre PDM (5.3), usando o laplaciano e o gradiente nestas coordenadas e usando o potencial efetivo (2.23), obtemos um sistema com duas equações desacopladas,

$$-\frac{1}{M}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_{\pm}}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_{\pm}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_{\pm}}{\partial\phi^2}\right\} + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi_{\pm} + \left(\frac{1}{2M^2}\nabla^2M - \frac{3}{4M^3}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)\psi_{\pm} = E\psi_{\pm}, \quad (5.4)$$

o operador $\hat{K} = \vec{\sigma} \cdot (\vec{L} + \mu \hat{r})$, sendo \vec{L} o operador momento angular generalizado [34], será muito importante aqui e entrará no tratamento da parte angular. Uma importante relação entre $K, K^2 \in L^2 \in [34, 36],$

$$L^{2} - \mu^{2} = K^{2} + K - \mu(\vec{\sigma} \cdot \hat{r}), \qquad (5.5)$$

sendo o operador L^2 dado por,

$$L^{2} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^{2}\theta} \frac{\partial^{2}}{\partial\phi^{2}} + \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^{2}\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\mu^{2}(1-\cos\theta)^{2}}{\sin^{2}\theta} + \mu^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial\phi} + \frac{\mu^{2}(1-\cos\theta)^{2}}{\sin^{2}\theta} + \frac$$

onde, conforme já mostramos anteriormente, $\mu = eg$, sendo e a carga elétrica fundamental (aqui tomada como $\sqrt{\alpha}$, pelo sistema de unidades escolhido) e g a carga magnética. Lembrando que a condição de quantização de Dirac diz que $\mu = eg = n/2$, com n sendo um inteiro.

É útil relembrar que uma classe importante de funções que ocorrem frequentemente na teoria quântica dos monopolos magnéticos é aquela composta pelas autofunções do operador L^2 . Estas funções frequentemente entram na parte angular das funções de onda exatas de partículas carregadas, interagindo com monopolos magnéticos e são chamados de harmônicos esféricos generalizados ou harmônicos de monopolo [33, 34]. A expressão para esta função pode ser vista em (3.22).

O operador momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ possui autovalores indicados como j, lembre-se que o espectro de autovalores do operador momento angular \vec{L} de um sistema carga-monopolo sem spin começa do valor mínimo $l = \mu$, sendo $l = \mu, \mu + 1, \mu + 2, ...$ e $-l \leq m \leq l$. Introduzindo o momento angular de spin e considerando a regra padrão para soma de momentos angulares, encontramos que o momento angular total \vec{J} possui autovalores mínimos j = l - 1/2 e j = l + 1/2. Assim, o espectro de autovalores j pode começar ou do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ ou do valor mínimo $j = \mu + 1/2$. Essas situações devem ser consideradas separadamente. Nas próximas subseções vamos construir o mapeamento somente para o caso $j = \mu - 1/2$, o tratamento para o caso $j = \mu + 1/2$ será deixado como trabalho futuro.

5.3.1 Mapeamento exato para o caso $j = \mu - 1/2$

Vamos iniciar apresentando uma autofunção de onda, definida em coordenadas esféricas, associada aos autovalores de \vec{J} partindo do valor mínimo $j = \mu - 1/2$, que é referido como "tipo 3" (o caso envolvendo o valor mínimo $j = \mu + 1/2$ é referido como "tipo 1 e 2"). Esta autofunção $\psi^{(3)}$ possui a seguinte estrutura,

$$\psi^{(3)}(r,\theta,\phi) = F_{k\ell}^{(3)}(r)\Omega_{\mu,j,m}^{(3)}(\theta,\phi), \qquad (5.7)$$

algumas vezes omitiremos os argumentos das funções para não sobrecarregar a notação. A parte radial é composta pelas já familiares ondas esféricas. Assim podemos escrever,

$$F_{k\ell}^{(3)}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\cos kr}{r},$$
(5.8)

onde $k = \sqrt{2m_0E}$ e $\ell = \sqrt{(j+1/2)^2 - \mu^2}$. Essas funções são soluções da seguinte equação radial,

$$-\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right]F_{k\ell}^{(3)} = 2m_0 E^{(3)}F_{k\ell}^{(3)},\tag{5.9}$$

a parte angular da função de onda $\psi^{(3)}$ é formada por funções espinoriais (bi-espinores) e no presente caso é dada pela seguinte expressão,

$$\Omega^{(3)}_{\mu,j,m}(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{\mu-m+1/2}{2\mu+1}}Y_{\mu\mu m-1/2}(\theta,\phi) \\ \sqrt{\frac{\mu+m+1/2}{2\mu+1}}Y_{\mu\mu m+1/2}(\theta,\phi) \end{pmatrix},$$
(5.10)

esta função espinorial é uma autofunção do operador $K \in (\vec{\sigma} \cdot \hat{r})$, isto é, [34],

$$K\Omega^{(3)}_{\mu,j,m} = -\Omega^{(3)}_{\mu,j,m}, \qquad (\vec{\sigma} \cdot \hat{r})\Omega^{(3)}_{\mu,j,m} = \Omega^{(3)}_{\mu,j,m}, \qquad (5.11)$$

substituindo a autofunção (5.7) na equação (5.4) e eliminando os dois termos angulares entre chaves usando as relações (5.11) com o a utilização do

operador (5.5), obtemos,

$$-\frac{\Omega_{\pm}^{(3)}}{Mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial F^{(3)}}{\partial r}\right) + \frac{F^{(3)}}{Mr^2}\left(1 - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right)\Omega_{\pm}^{(3)}$$
$$+\frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi_{\pm}^{(3)} + \left(\frac{1}{2M^2}\nabla^2M - \frac{3}{4M^3}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)F^{(3)}\Omega_{\pm}^{(3)}$$
$$= EF^{(3)}\Omega_{\pm}^{(3)}, \qquad (5.12)$$

onde $\Omega^{(3)}_{+}$ é a componente "up" e $\Omega^{(3)}_{-}$, a componente "down" do bi- espinor $\Omega^{(3)}_{\mu,j,m}$. Podemos eliminar as derivadas radiais de $F^{(3)}_{k\ell}(r)$ utilizando a equação (5.9), no entanto o termo contendo a derivada primeira de $\Omega^{(3)}$ com relação a ϕ , cujo resultado é,

$$\frac{\partial \Omega_{\pm}^{(3)}}{\partial \phi} = -i(\mu + m \mp 1/2)\Omega_{\pm}^{(3)}, \qquad (5.13)$$

não pode ser descartado porque os coeficientes $(\mu + m + 1/2)$ e $(\mu + m - 1/2)$ não podem ser simultaneamente nulos, ou seja, não poderíamos considerar uma simetria azimutal nesse sistema. Eliminando assim $F^{(3)}\Omega^{(3)}$, multiplicando ambos os lados por $2M^2$ e realizando as simplificações necessárias, obtemos,

$$\nabla^2 M - \frac{3}{2} \frac{(\vec{\nabla} M)^2}{M} + \frac{2}{\psi_{\pm}^{(3)}} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi_{\pm}^{(3)} - \frac{2M\mu}{r^2} + \frac{4\mu(\mu + m \mp 1/2)(1 - \cos\theta)M}{r^2 \sin^2\theta} - \frac{2\mu^2 (1 - \cos\theta)^2 M}{r^2 \sin^2\theta} = 2M(M - 2m_0)E,$$
(5.14)

que é o sistema com duas EDP de mapeamento para o tipo 3. Vamos considerar, por uma questão de simplicidade, que a distribuição de massa Mdependa apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r). Com esta suposição, obtemos um sistema com duas ODE para a distribuição de massa M(r), tal como ocorreu nos casos anteriores, e precisamos também considerar um valor específico de θ , digamos θ_0 , para resolver as duas ODE do sistema. Assim, as equações (5.14) assumem a seguinte forma,

$$\frac{d^2M}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dM}{dr} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{dr}\right)^2 + \frac{2}{F_{k\ell}^{(3)}}\frac{dF_{k\ell}^{(3)}}{dr}\frac{dM}{dr} + \frac{4\mu(\mu+m\mp1/2)(1-\cos\theta_0)M}{r^2\sin^2\theta_0}$$
$$-\frac{2M\mu}{r^2} - \frac{2\mu^2(1-\cos\theta_0)^2M}{r^2\sin^2\theta_0} = 2M(M-2m_0)E,$$
(5.15)

estas equações serão o nosso "cavalo de batalha". Observamos claramente que elas ainda não são separáveis por causa do termo M^2 no lado direito. A suposição feita considerando uma dependência puramente radial não removeu todos os termos não-lineares das equações (tal como ocorreu com os casos anteriores), estas EDO também contêm um termo complicado envolvendo a função radial $F_{k\ell}^{(3)}$ e sua primeira derivada. Na próxima subseção resolveremos numericamente essas EDO não-lineares utilizando o software Mathematica.

Soluções numéricas

Considerando que a massa depende apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r), precisamos obter um valor específico de θ , digamos θ_0 , para resolver as equações (5.15) numericamente. Vamos escolher as condições iniciais $M(r_i) = 1 e M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20 e$ vamos fixar $\theta_0 = \pi/6$. Devido ao termo que contém o fator ($\mu + m \mp 1/2$) — um para cada equação, diferindo apenas no sinal de 1/2 — ambas as equações do sistema podem ter diferentes soluções, o que não é fisicamente aceitável na presente situação! Entretanto, verificamos que ambas as equações têm aproximadamente a mesma solução M(r) no intervalo 0, 20 < r < 0, 50 se a seguinte condição for satisfeita,

$$8 \le |\mu + m| \le 14,\tag{5.16}$$

isto é, essa condição estabelece aproximadamente que, para determinados valores de $\mu + m$, não há mapeamento entre o sistema carga-monopolo (lembrando que a carga interagente com o monopolo é um férmion com spin

1/2, no regime de baixas energias) e algum sistema quântico PDM. Vamos procurar por soluções onde $\mu = 5 \text{ e } m = 9/2$. As equações (5.15) serão numericamente resolvidas pelo software Mathematica, considerando um problema de valor inicial padrão, a saber $M(r_i) = 1$, $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0, 20$. Fixaremos um autovalor de energia E = 1 e escolheremos a massa da partícula (carga) do sistema alvo $m_0 = m_e = 1$.

As soluções para as duas equações (5.15) são apresentadas na Fig. 5.1. Podemos notar que ambas as soluções estão sobrepostas no intervalo 0, 20 < r < 0, 50 e esta superposição se torna mais acentuada com o aumento de μ . Estas soluções tendem ao infinito próximo de r_i e não possuem máximo ou mínimo local. O potencial efetivo correspondente a esta solução é determinado pela expressão (2.23) e as curvas para os respectivos potenciais efetivos são apresentadas na Fig. 5.2. Para este caso também não existe máximo ou mínimo local. As distribuições de massa M e os respectivos potenciais efetivos U_{eff} são os nossos modelos análogos para o sistema alvo carga-monopolo não-relativístico com spin 1/2.

Em relação aos tipos 1, 2 e 3, é interessante mencionar que, do ponto de vista da supersimetria dinâmica do sistema, a diferença entre os estados do tipo 3 e tipos 1 e 2 é que os estados com $j = \mu - 1/2$ têm o subgrupo SO(2, 1) como o único grupo de simetria dinâmica e estados com $j \ge \mu + 1/2$ transformam-se sob a representação do supergrupo OSp(1, 1).

5.4 Conclusão

Neste capítulo investigamos o sistema carga-monopolo não-relativístico via equação de Pauli livre PDM e construímos um mapeamento exato entre este sistema e um sistema quântico PDM (modelo análogo). Substituímos a



Figura 5.1: Soluções radiais do sistema (5.15). As condições iniciais são M(r)usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Aqui fixamos $\theta_0 = \pi/6$. note que ambas as soluções estão praticamente sobrepostas. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5$, j = m = 9/2, E = 1 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 5.2: Potencial efetivo calculado usando a solução do sistema (5.15). As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1 \text{ e } M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Aqui fixamos $\theta_0 = \pi/6$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5$, j = m = 9/2, E = 1 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 5.3: Soluções radiais do sistema (5.15) para determinados autovalores de energia. As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Aqui fixamos $\theta_0 = \pi/6$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5$, j = m = 9/2 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 5.4: Soluções radiais do sistema (5.15) para alguns valores do ângulo θ_0 . As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o monopolo está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 5$, j = m = 9/2, E = 1 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

solução exata do sistema alvo na equação de Pauli livre PDM e após algumas manipulações algébricas, obtemos um sistema desacoplado com duas EDP não-lineares para a distribuição de massa M. O mapeamento foi realizado somente para o caso onde os autovalores do operador J iniciam do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ (conhecido como tipo 3) e considerando apenas uma dependência radial, pudemos obter um sistema com duas EDO desacopladas. Considerando a condição aproximada (5.16), resolvemos as equações numericamente e apresentamos as soluções graficamente, bem como os gráficos dos potenciais efetivos associados. Assim, ilustramos nossos resultados nas figuras 5.1 - 5.4. As curvas referentes às soluções radiais para alguns autovalores de energia foram mostradas na Fig. 5.3 e as curvas para alguns valores do ângulo θ_0 foram mostradas na Fig. 5.4. Em suma, os resultados apresentados nas Fig. 5.1 - 5.4 representam o nosso modelo análogo para o sistema carga-monopolo não-relativístico com spin 1/2.

Capítulo 6

Mapeamento entre o sistema carga-dyon e sistemas com massa efetiva dependente da posição via equação de Pauli

Neste capítulo daremos continuidade ao mapeamento exato do sistema cargadyon não-relativístico, com spin 1/2 (sistema alvo) em um sistema quântico PDM (modelo análogo), via equação de Pauli livre PDM. Iremos considerar somente o estado ligado (eQ < 0), além disso consideraremos as mesmas condições de resolução do capítulo 5. Os resultados serão obtidos utilizando técnicas numéricas e serão apresentados graficamente.

6.1 Introdução

Neste capítulo daremos continuidade ao trabalho desenvolvido no capítulo anterior, onde fizemos um mapeamento exato do sistema carga-monopolo com spin 1/2 em um dado sistema quântico PDM, utilizando a equação de Pauli livre PDM. No presente capítulo, construiremos outro mapeamento, entretanto considerando no lugar do sistema carga-monopolo um sistema carga-dyon. Os desenvolvimentos serão os mesmos utilizados no caso anterior, a diferença basicamente se encontra no fato de termos agora uma carga elétrica Q associada ao monopolo, isto basicamente modifica a parte radial da solução exata deste sistema alvo. Neste trabalho, consideraremos um sistema ligado, impondo que eQ < 0, esta imposição implica diretamente em um espectro de autovalores de energia discreto, o que também difere o atual caso do anterior.

Relembrando um pouco da definição do dyon (sobre o qual já foi falado no capítulo 4) este também é uma partícula hipotética, assim como o monopolo, contudo tendo simultaneamente carga elétrica e magnética. Essa partícula foi proposta por J. Schwinger em 1969 [48] como um modelo fenomenológico alternativo ao modelo dos quarks. O estudo de dyons e monopolos magnéticos isolados tem recebido alguma atenção nos últimos anos e vários trabalhos sobre este assunto estão disponíveis na literatura [40, 41, 42, 69], bem como no livro - *Magnetic monopoles* - do Yakov M. Shnir [34], entre outros [35, 36, 44, 46, 45]. Vale lembrar que, no aspecto experimental, a física dos monopolos magnéticos já foi reproduzida no sistema conhecido como gelo de spin [37, 38, 39], já foi reproduzida também com o uso de metamateriais [43] e recentemente foi realizada a criação de um par monopolo-antimonopolo de Dirac, em um condensado de Bose-Einstein com spin 1. [47].

Nos mapeamentos utilizando a equação de Schrödinger PDM, pudemos perceber que haviam algumas semelhanças entre aqueles que utilizam os sistemas carga-monopolo e carga-dyon: estes últimos envolvem funções hipergeométricas confluentes $_1F_1$, assim como o produto eQ entre as cargas elétricas. Estas semelhanças ainda permanecem no presente caso. Por fim, utilizaremos as mesmas expressões e considerações da seção 5.2, isto é, os resultados vistos naquela seção serão também utilizados no presente caso.

6.2 Mapeamento exato do sistema carga-dyon em um sistema quântico PDM via equação livre de Pauli

Na presente seção estabeleceremos o mapeamento exato entre o sistema carga-dyon (sistema alvo) e sistemas quânticos PDM (modelo análogo) através da equação de Pauli livre PDM. Construiremos uma correspondência entre o sistema composto por um férmion eletricamente carregado, de massa constante m_0 e spin 1/2, interagindo com um dyon e o sistema composto pelo mesmo férmion, entretanto interagindo com um potencial efetivo U_{eff} associado a um "background" PDM. A fim de obter tal mapeamento, substituímos a função de onda exata do sistema carga-dyon na equação de Pauli livre PDM (5.3) e resolvemo-la para a massa. Neste capítulo também utilizaremos coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Assim, considerando o Laplaciano nestas coordenadas e o potencial efetivo (2.23), o sistema (5.3) torna-se,

$$-\frac{1}{M} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_{\pm}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_{\pm}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_{\pm}}{\partial \phi^2} \right\} + \frac{1}{M^2} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi_{\pm} + \left(\frac{1}{2M^2} \nabla^2 M - \frac{3}{4M^3} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M \right) \psi_{\pm} = E_N \psi_{\pm}.$$
(6.1)

O quadrado do operador $K = \vec{\sigma} \cdot (\vec{L} - \mu \hat{r})$ [34] será, da mesma forma que no capítulo anterior, muito importante para lidar com a parte angular e a expressão pode ser vista em (5.5). Os harmônicos esféricos generaliza-
dos $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$ [33, 34] também ocorrerão na parte angular da autofunção exata do sistema carga-dyon. Neste sentido, o tratamento da parte angular é idêntico ao caso envolvendo o sistema carga-monopolo, a diferença ocorrerá basicamente na parte radial.

A carga Q do dyon será considerada neste capítulo como um múltiplo não-positivo da carga fundamental $e = \sqrt{\alpha}$, ou seja, $Q = ne = n\sqrt{\alpha}$ com $n \in \mathbb{Z}_{-},$ logo temos eQ = $n\alpha.$ Assim, em nosso sistema alvo carga-dyon, por causa da condição eQ < 0, o espectro de energia será discreto e rotulado por um número quântico N. O operador momento angular generalizado $\vec{J} = \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ tem autovalores representados como j, lembre-se que o espectro de autovalores do operador de momento angular \vec{L} de um sistema cargamonopolo sem spin começa do valor mínimo $l = \mu$, sendo $l = \mu, \mu + 1, \mu + 2...$ No entanto, se introduzirmos o momento angular de spin e considerarmos a regra padrão de adição para momentos angulares, o momento angular total \vec{J} terá autovalores mínimos j = l - 1/2 e j = l + 1/2. Assim, o espectro de autovalores jpoderá partir ou do valor mínimo $j=\mu-1/2$ ou do valor mínimo $j = \mu + 1/2$, essas situações devem ser consideradas separadamente. Nas próximas subseções vamos construir o mapeamento somente para o caso dos autovalores j partindo do valor mínimo $j = \mu - 1/2$, conforme foi feito no capítulo 5.

6.2.1 Mapeamento exato para o caso $j = \mu - 1/2$

As funções de onda para o sistema carga-dyon que correspondem aos autovalores do operador \vec{J} iniciando de $j = \mu - 1/2$ são,

$$\psi^{(3)}(r,\theta,\phi) = F_{k\ell}^{(3)}(r)\Omega_{\mu,j,m}^{(3)}(\theta,\phi), \qquad (6.2)$$

algumas vezes omitiremos os argumentos das funções para simplificar a notação. A parte radial é dada pela seguinte expressão,

$$F_{k\ell}^{(3)}(r) = 2\left(\frac{n\alpha}{N+1}\right)^{3/2} e^{-kr} {}_{1}F_{1}(-N;2;2kr), \qquad (6.3)$$

onde $k^2 = -2m_0 E_N^{(3)} > 0$, a função ${}_1F_1$ é a chamada função hipergeométrica confluente [34], N é um número quântico radial N = 0, 1, 2... e ℓ está relacionado ao número quântico angular j via,

$$\ell = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2},$$
(6.4)

a função radial $F_{k\ell}^{(3)}(r)$ satisfaz a seguinte equação,

$$-\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2m_0eQ}{r}\right]F_{k\ell}^{(3)} = 2m_0E_N^{(3)}F_{k\ell}^{(3)},\tag{6.5}$$

a parte angular é a mesma do caso anterior, isto é, $\Omega_{\mu,j,m}^{(3)}(\theta,\phi)$ ainda é dada pela expressão (5.10), a qual é, relembrando, uma autofunção do operador K, com $K^2 \Omega_{\mu,j,m}^{(3)} = \Omega_{\mu,j,m}^{(3)}$. Substituindo o bi-espinor (6.2) na equação (6.1) e eliminando os termos angulares usando operador (5.5) obtemos,

$$-\frac{\Omega^{(3)}}{Mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial F^{(3)}}{\partial r}\right) + \frac{F^{(3)}}{Mr^2}\left(-\mu - \frac{2i\mu(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\mu^2(1-\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right)\Omega^{(3)} + \frac{1}{M^2}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}\psi^{(3)}_{\pm} + \left(\frac{1}{2M^2}\nabla^2M - \frac{3}{4M^3}\vec{\nabla}M\cdot\vec{\nabla}M\right)F^{(3)}\Omega^{(3)} = E_NF^{(3)}\Omega^{(3)},$$
(6.6)

podemos eliminar as derivadas radiais de $F_{k\ell}^{(3)}(r)$ utilizando a equação (6.5), no entanto o termo contendo a primeira derivada de $\Omega^{(3)}$ em ϕ , cujo resultado é,

$$\frac{\partial\Omega^{(3)}}{\partial\phi} = -i(\mu + m \mp 1/2)\Omega^{(3)}, \qquad (6.7)$$

não pode ser descartado porque os coeficientes $(\mu + m + 1/2)$ e $(\mu + m - 1/2)$ não podem ser simultaneamente nulos, ou seja, a situação aqui é idêntica à vista no capítulo 5 e novamente não poderemos considerar uma simetria azimutal nesse sistema. Eliminando assim $F^{(3)}\Omega^{(3)}$, multiplicando ambos os lados por $2M^2$ e implementando as simplificações necessárias, obtemos nossas equações de mapeamento para o tipo 3,

$$\nabla^2 M - \frac{3}{2} \frac{(\vec{\nabla} M)^2}{M} + \frac{4m_0 eQM}{r} + \frac{2}{\psi_{\pm}^{(3)}} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} \psi_{\pm}^{(3)} + \frac{4\mu(\mu + m \mp 1/2)(1 - \cos\theta)M}{r^2 \sin^2\theta} - \frac{2M\mu}{r^2} - \frac{2\mu^2(1 - \cos\theta)^2 M}{r^2 \sin^2\theta} = 2M(M - 2m_0)E_N^{(3)}, \tag{6.8}$$

consideraremos novamente, por uma questão de simplicidade, que a distribuição em massa M dependerá apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r). Agora precisamos fixar um valor específico de θ , digamos θ_0 , para resolver o ODE. Então as duas equações (6.8) assumem a forma,

$$\frac{d^2M}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dM}{dr} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{dr}\right)^2 + \frac{2}{F_{k\ell}^{(3)}}\frac{dF_{k\ell}^{(3)}}{dr}\frac{dM}{dr} + \frac{4\mu(\mu + m \mp 1/2)(1 - \cos\theta)M}{r^2\sin^2\theta} + \frac{4m_0n\alpha M}{r} - \frac{2M\mu}{r^2} - \frac{2\mu^2(1 - \cos\theta)^2M}{r^2\sin^2\theta} = 2M(M - 2m_0)E_N^{(3)},$$
(6.9)

onde estamos utilizando $eQ = n\alpha$. O termo $4m_0n\alpha M/r$ está relacionado ao potencial elétrico Coulombiano. O nosso sistema alvo, composto por uma partícula carregada e um dyon, terá um espectro discreto de energia, por causa da condição imposta eQ < 0. Os autovalores de energia serão dados pela seguinte expressão,

$$E_N^{(3)} = -\frac{(n\alpha)^2}{2(N+1)^2}.$$
(6.10)

Soluções numéricas

Considerando que a massa depende apenas da coordenada radial, ou seja, M = M(r), precisamos escolher um valor particular para θ_0 , a fim de resolver as equações (6.9) numericamente. Vamos escolher condições iniciais iguais ao caso anterior, isto é, $M(r_i) = 1 \text{ e } M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20 \text{ e vamos fixar } \theta_0 = \pi/6$. Devido ao termo que contém o fator $(\mu + m \mp 1/2)$, um para cada equação e diferindo apenas no sinal de 1/2, ambas as equações do sistema podem ter diferentes soluções, o que também não é fisicamente aceitável. Entretanto, verificamos que ambas as equações têm aproximadamente a mesma solução M(r) no intervalo 0, 20 < r < 0, 50 se a seguinte condição aproximada for válida,

$$10 \le |\mu + m| \le 20, \tag{6.11}$$

que é uma condição semelhante àquela estabelecida para o caso anterior, ou seja, para certos valores de $\mu + m$ não há mapeamento entre o sistema carga-dyon e algum sistema quântico PDM. As equações (6.9) serão numericamente resolvidas pelo software Mathematica considerando por conveniência $\mu = 7, m = 13/2$ e N = 0. Vamos considerar que a carga Q do dyon vale $Q = -1800e = -1800\sqrt{\alpha}$. As soluções para as duas equações (6.9) são apresentadas na Fig. 6.1, podemos notar que ambas as soluções correspondem no intervalo 0, 20 < r < 0, 50 e tendem ao infinito perto de r_i . O potencial efetivo correspondente a esta solução é determinado pela expressão (2.23) e a sua curva é apresentada na Fig. 6.2, para este caso existe um mínimo local. Estes resultados para a distribuição de massa M e para o potencial efetivo U_{eff} são o nosso modelo análogo para o sistema alvo carga-dyon não-relativístico com spin 1/2.

6.3 Conclusão

Neste capítulo estudamos o sistema carga-dyon não-relativístico com spin 1/2 via equação de Pauli (sistema alvo), construindo também um mapeamento exato entre este sistema e um sistema quântico PDM (sistema análogo). O



Figura 6.1: soluções numéricas do sistema (6.9), a carga elétrica do dyon Qfoi fixada em $-1800\sqrt{\alpha}$. As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Fixamos $\theta_0 = \pi/6$. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o dyon está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 7$, j = m = 13/2, N = 0 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 6.2: Potencial efetivo calculado usando a solução do sistema (6.9). As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$. Fixamos $\theta_0 = \pi/6$ e consideramos n = -1800. Tão perto quanto se aproxima da origem, onde o dyon está localizado, a solução diverge. Usamos $\mu = 7$, j = m = 13/2, N = 0 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.



Figura 6.3: Comparação da distribuição em massa M(r) considerando dois valores distintos de n. Para n = 0 temos um monopolo na origem. As condições iniciais são M(r) usando $M(r_i) = 1$ e $M'(r_i) = 0$ para $r_i = 0.20$, aqui fixaremos $\theta_0 = \pi/6$. Na medida que o valor de n aumenta de -1800 para 0, a curva aproxima-se da origem. Usamos mu = 7, j = m = 13/2, N = 0 e unidades onde $\hbar = m_e = c = 1$.

procedimento é idêntico aos casos anteriores, isto é, substituímos a solução exata do sistema alvo na equação de Pauli livre PDM, obtendo um sistema desacoplado com duas EDP não-lineares para a distribuição de massa M. Assim, conforme feito no capítulo 5, tratamos somente o caso dos autovalores do operador \vec{J} que iniciam do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ (tipo 3). Considerando apenas uma dependência radial e novamente a condição (6.11), resolvemos as EDO numericamente e apresentamos os resultados graficamente, bem como as curvas dos potenciais efetivos associados. Ilustramos nossos resultados nas figuras 6.1- 6.3. Na Fig. 6.3 comparamos as distribuições para o sistema carga-monopolo (n = 0) e para o sistema carga-dyon (n = -1800). Resumindo, os resultados apresentados nas Fig. 6.1 - 6.3 **representam o nosso modelo análogo para o sistema carga-dyon não-relativístico, com spin 1/2.**

Capítulo 7

Mapeamento entre o espaço cônico e sistemas com massa efetiva dependente da posição

Neste capítulo realizaremos o mapeamento exato de uma partícula escalar e neutra, vinculada a um espaço cônico (sistema alvo) em um sistema quântico PDM (modelo análogo). Obteremos a EDP partindo da equação de Schrödinger livre PDM e da autofunção exata do sistema alvo. A EDP se converterá em uma EDO considerando que a distribuição de massa dependa somente da coordenada radial. Resolveremos esta EDO numericamente e apresentaremos graficamente os resultados para certos autovalores de energia.

7.1 Introdução

Sistemas quânticos bidimensionais têm recebido uma considerável atenção nos últimos anos, devido ao seu extenso uso na Física da Matéria Condensada [80, 81]. Da mesma forma, sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição (sistemas quânticos PDM) têm sido estudados e utilizados em um número significativo de trabalhos [1 - 28] e um considerável interesse por este assunto tem crescido também nos últimos anos. Sistemas quânticos PDM aparecem principalmente no estudo de fenômenos de transporte [8, 82] e em semicondutores de uma composição química variável e dependente da posição [1]. Há também aplicações desses sistemas para modelar materiais que manifestam efeitos de invisibilidade [15], entre outros.

O espaço cônico, que também tem sido estudado por vários autores [49, 50, 51], oferece uma das geometrias não-triviais mais simples porque é localmente plano em todos os lugares, exceto no seu vértice, onde existe uma singularidade. A singularidade não afeta a dinâmica local, porém afeta a global. Um partícula vinculada a este espaço está sujeita à ação de dois potenciais geométricos: um potencial do tipo quadrado inverso e um potencial do tipo delta δ , estes potenciais geométricos surgem naturalmente no espaço cônico. Essa geometria cônica não-trivial aparece como uma espécie de geometria efetiva em várias situações físicas, como defeitos em cristais líquidos [52], defeitos em meios elásticos [53] etc.. É importante mencionar que entre vários trabalhos podemos listar a pesquisa sobre calor específico de uma partícula neutra no cone [54], sobre a dinâmica quântica de uma partícula pontual no espaço cônico [55, 56], sobre a dinâmica quântica não relativista em um cone com e sem um potencial limitante [57] e no movimento quântico em um cone [58].

Nos capítulos anteriores, foi proposta uma metodologia para mapear em um sistema quântico PDM (o nosso modelo análogo) — que a princípio poderia ser construído em laboratório — um dado sistema quântico, que atualmente não pode ser realizado experimentalmente (o nosso sistema alvo). Foram apresentados modelos análogos dos sistemas carga-monopolo e cargadyon, utilizando a equação de Schrödinger PDM, a equação de Klein-Gordon PDM e a equação de Pauli PDM. No presente capítulo, vamos mudar um pouco a natureza do sistema alvo e partir para um mapeamento envolvendo uma partícula escalar e neutra, vinculada a uma superfície cônica.

Nossa abordagem é exatamente a mesma dos capítulos anteriores, isto é, substituir a função de onda exata do sistema alvo na equação de Schrödinger livre PDM [68] e obter uma equação diferencial para a distribuição de massa M. Se pudermos resolver esta equação, encontraremos a distribuição de massa efetiva - que por sua vez também pode ser interpretada como um potencial efetivo - que reproduz exatamente as autofunções e os autovalores de energia do sistema alvo. Essa equação será não-linear e recorreremos à simplificações e à técnicas numéricas para resolvê-la.

7.2 Partícula neutra no espaço cônico

Vamos utilizar esta seção para discutir algumas características geométricas do espaço cônico. Considere um sistema de coordenadas polares (r, θ) , com a origem no vértice do cone. Para um ponto pertencente à superfície cônica, a métrica neste sistema de coordenadas é,

$$ds^{2} = \alpha^{-2}dr^{2} + r^{2}d\theta^{2}, \qquad (7.1)$$

onde α é o chamado parâmetro do cone e este pertence ao intervalo $0 < \alpha \leq$ 1. Note que as coordenadas polares determinam o mesmo ponto $(r, \theta) \sim$ $(r, \theta + 2\pi)$. Desta forma é conveniente fazer uma modificação nesse sistema, redimensionando (r, θ) como,

$$\rho = \alpha^{-1} r \qquad \qquad \varphi = \alpha \theta, \tag{7.2}$$



Figura 7.1: Planificação do cone com ângulo deficitário D e raio a = 1.

com essa redefinição, a métrica assume uma forma mais simples $ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2$. Como consequência desta transformação temos $(\rho, \varphi) \sim (\rho, \varphi + 2\pi\alpha)$, este sistema modificado é singular e definido em um disco (planificação do cone) de raio *a* com a ausência de um setor circular de ângulo de abertura *D*, chamado de ângulo deficitário do cone (Fig. 7.1),

Podemos escrever o ângulo deficitário D em função do parâmetro do cone α . A relação entre eles é,

$$D = 2\pi(1 - \alpha),\tag{7.3}$$

é útil mencionar que ainda podemos relacionar o parâmetro α ao ângulo de abertura γ do cone, isto é,

$$\alpha = \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right),\tag{7.4}$$

usaremos neste capítulo as autofunções de uma partícula vinculada em um espaço cônico (para mais detalhes sobre estas autofunções, consultar as referências [55, 58]). Essas autofunções devem satisfazer uma restrição de periodicidade, a saber $\psi(\rho, \varphi) = \psi(\rho, \varphi + 2\pi\alpha)$ e podem ser dadas na forma exponencial ou nas duas seguintes formas,

$$\psi^{-}(\rho,\varphi) = AJ_{\lambda}(k\rho)\sin(\lambda\varphi), \qquad (7.5)$$

ou

$$\psi^{+}(\rho,\varphi) = BJ_{\lambda}(k\rho)\cos(\lambda\varphi), \qquad (7.6)$$

onde A e B são constantes e $J_{\lambda}(k\rho)$ é a função de Bessel de ordem λ , sendo $k_{\lambda,s} = z_{\lambda,s}/a$,. A ordem λ da função de Bessel está relacionada ao parâmetro do cone α via,

$$\lambda = \frac{|n|}{\alpha},\tag{7.7}$$

onde n é um número inteiro. Os autovalores de energia para uma partícula em um espaço cônico formam um espectro discreto, devido à condição vincular da partícula, e são proporcionais aos zeros da função de Bessel $z_{\lambda,s}$. O espectro de energia é dado pela seguinte expressão,

$$E_n = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{z_{\lambda,s}}{a}\right)^2,\tag{7.8}$$

onde m_0 é a massa da partícula neutra vinculada ao espaço cônico, s é um inteiro positivo, sendo que $z_{\lambda,s}$ denota o s-ésimo zero da função de Bessel e a é o raio do disco.

7.3 Mapeamento exato de uma partícula neutra vinculada a um espaço cônico em um sistema quântico PDM

Nesta seção será apresentado o mapeamento exato de uma partícula quântica escalar e neutra, não-relativística e restrita a mover-se em uma superfície

cônica (sistema alvo), utilizando sistemas quânticos PDM (sistema análogo). A estrutura básica do modelo pode ser obtida, assim como foi feito nos capítulos anteriores, de um simples problema de autovalor,

$$H_0\psi(\rho,\varphi) = E_n\psi(\rho,\varphi),\tag{7.9}$$

onde E_n é um autovalor discreto de energia dado por (7.8) e o Hamiltoniano H_0 é dado pela expressão (2.18). Podemos então considerar a equação de Schrödinger livre PDM (2.21) e de pronto começar a construir o modelo para o mapeamento utilizando as funções (7.5) ou (7.6). Neste capítulo, diferentemente dos anteriores, será utilizado o sistema de unidades atômicas de Rydberg, onde $\hbar = 2m_e = 1$ e serão utilizadas também coordenadas polares reescaladas (ρ, φ). Neste trabalho será utilizado também o ordenamento de Zhu-Kroemer [5] e, consequentemente, a expressão (2.23) para o potencial efetivo. Utilizando o Laplaciano e o gradiente em coordenadas polares, a equação (7.9) pode ser escrita em uma forma mais explícita,

$$-\frac{1}{M}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] + \frac{1}{M^2}\left[\frac{\partial M}{\partial\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial M}{\partial\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right] + U_{eff}\psi = E_n\psi,$$
(7.10)

seguindo a ideia dos capítulos anteriores, o objetivo aqui é mapear uma partícula quântica escalar, neutra, não-relativística, de massa m_0 e vinculada a um espaço cônico (sistema alvo) em um dado sistema quântico PDM (modelo análogo), ou seja, um sistema onde uma partícula interage com um potencial efetivo dado por (2.23) e que possui exatamente as mesmas autofunções e autovalores de energia do primeiro. Vamos considerar a autofunção para a partícula neutra no espaço cônico e procurar por uma distribuição de massa M que possa reproduzir a dinâmica dessa partícula. Gostaríamos de enfatizar que a massa da partícula restrita ao espaço cônico é considerada constante e igual a m_0 . Assim, o que pretendemos fazer é simplesmente criar um modelo análogo, utilizando sistemas quânticos PDM.

7.3.1 Equação diferencial para o mapeamento exato

A construção do nosso modelo análogo inicia quando substituímos as autofunções (7.5) ou (7.6) na equação de Schrödinger livre PDM dada em (7.10), juntamente com o uso da forma explícita do potencial efetivo U_{eff} dada pela expressão (2.23). Assim, conforme já foi feito nos capítulos anteriores, vamos partir para a construção da EDP para a distribuição de massa $M(\rho, \varphi)$, que representa o nosso modelo análogo. Vamos escolher por conveniência a função (7.5) — os cálculos para (7.6) são idênticos — para a construção da EDP do mapeamento exato. Substituindo então esta função em (7.10), temos,

$$-\frac{1}{M} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} J_{\lambda}(k\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} J_{\lambda}(k\rho) - \frac{\lambda^2}{\rho^2} J_{\lambda}(k\rho) \right] + \frac{1}{M^2} \left[\frac{\partial M}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \rho} J_{\lambda}(k\rho) - \frac{\lambda^2}{\rho^2} \frac{\partial M}{\partial \varphi} J_{\lambda}(k\rho) \cot(\lambda\varphi) \right] + \left(\frac{1}{2M} \nabla^2 M - \frac{3}{4M^2} \vec{\nabla} M \cdot \vec{\nabla} M \right) J_{\lambda}(k\rho)$$

$$= E_n J_{\lambda}(k\rho), \qquad (7.11)$$

podemos utilizar a equação de Bessel para eliminar as derivadas radiais no primeiro colchete, visto que,

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}J_{\lambda}(k\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}J_{\lambda}(k\rho) = -\left(k^2 - \frac{\lambda^2}{\rho^2}\right)J_{\lambda}(k\rho), \qquad (7.12)$$

substituindo então esta equação em (7.11), eliminamos as derivadas radiais e também o termo $\lambda^2/\rho^2 J_{\lambda}(k\rho)$. Então, multiplicando a expressão resultante por $2M^2$, dividindo por $J_{\lambda}(k\rho)$ e considerando $k^2 = 2m_0 E_n$, obtemos,

$$\nabla^2 M - \frac{3}{2} \frac{(\vec{\nabla} M)^2}{M} - \frac{2\lambda}{\rho^2} \frac{\partial M}{\partial \varphi} f_\lambda(\varphi) + \frac{2}{J_\lambda(k\rho)} \frac{\partial M}{\partial \rho} \frac{d}{d\rho} J_\lambda(k\rho) = 2M E_n(M - 2m_0),$$
(7.13)

esta é uma EDP de segunda ordem não-linear onde $f_{\lambda}(\varphi) = \tan(\lambda \varphi)$ para (7.5) e $f_{\lambda}(\varphi) = \cot(\lambda \varphi)$ para (7.6). Infelizmente esta equação é bastante complicada e não podemos utilizar a técnica de separação de variáveis para resolvê-la. Vamos considerar um caso particular onde $M = M(\rho)$, ou seja, quando a massa depende apenas da coordenada radial ρ , isto implica diretamente em $\partial M/\partial \varphi = 0$ e nossa equação simplifica para,

$$\frac{d^2M}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dM}{d\rho} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{d\rho}\right)^2 + \frac{2}{J_\lambda(k\rho)}\frac{dM}{d\rho}\frac{d}{d\rho}J_\lambda(k\rho) = 2ME_n(M-2m_0),$$
(7.14)

esta última equação, embora mais simples que a equação (7.13), ainda contém o complicado termo envolvendo a derivada da Bessel $J_{\lambda}(k\rho)$, bem como o termo quadrático M^2 e continua sendo não-linear. Na próxima seção buscaremos então por soluções numéricas de (7.14).

7.3.2 Soluções numéricas

Nesta seção abordaremos o problema de resolver a equação (7.14) numericamente. Para esta tarefa utilizamos o software Mathematica e as condições iniciais $M(\rho_i) = 1/2$ e $M'(\rho_i) = 0$ para $\rho_i = 0.01$. Assim, a singularidade cônica próxima a origem é evitada pelas condições iniciais (vale ressaltar que os níveis de energia com n = 0 não são afetados pela singularidade cônica [54]). Vamos fixar a massa da partícula vinculada ao espaço cônico (sistema alvo) em $m_0 = m_e = 1/2$. Na Fig.7.2 apresentamos graficamente as soluções radiais da equação (7.14) correspondentes a três autovalores distintos de energia, determinados a partir da expressão (7.8). Podemos observar que a distribuição de massa M varia suavemente com a distância radial.

O potencial efetivo U_{eff} para cada solução também pode ser determinado numericamente por meio da expressão (2.23). As curvas para este potencial, correspondente a cada solução radial, podem ser vistas na Fig. 7.3. Em suma, as soluções radiais de (7.14), que são as distribuições de massa M, e os potenciais efetivos U_{eff} correspondentes **representam o nosso modelo** análogo do sistema quântico composto por uma partícula não relativística, escalar e neutra, vinculada ao espaço cônico.



Figura 7.2: Soluções numéricas de equação (7.14) para três autovalores de energia. As condições iniciais são $M(\rho_i) = 1/2$ e $M'(\rho_i) = 0$ para $\rho_i = 0.01$, aqui usamos apenas o primeiro zero da função de Bessel. Tão perto quanto se aproxima do limite do cone a, a solução diverge. Consideramos $\alpha = 1/2$, a = 1 e usamos unidades onde $\hbar = 2m_0 = 1$.

7.4 Aproximação para pequenos valores de ρ

Nesta última seção da tese estudaremos uma solução da equação (7.14) para valores pequenos da coordenada radial ρ . Nesta equação existem vários termos não-lineares. Vamos lidar com o seguinte termo que envolve a função de Bessel $J_{\lambda}(k\rho)$ e sua derivada. Usando propriedades das derivadas, podemos



Figura 7.3: Potenciais efetivos para as soluções radiais de (7.14) com três autovalores de energia. As condições iniciais são as mesmas usadas anteriormente. Consideramos $\alpha = 1/2$, a = 1 e usamos unidades onde $\hbar = 2m_0 = 1$.

reescrever este termo como,

$$\frac{2}{J_{\lambda}(k\rho)}\frac{dM}{d\rho}\frac{d}{d\rho}J_{\lambda}(k\rho) = 2\frac{dM}{d\rho}\frac{d}{d\rho}\ln J_{\lambda}(k\rho), \qquad (7.15)$$

expandindo a função $J_{\lambda}(k\rho)$, truncando o segundo termo e avaliando o logaritmo e sua derivada, a última expressão se torna,

$$2\frac{dM}{d\rho}\frac{d}{d\rho}\ln J_{\lambda}(k\rho) = \left[\frac{2\lambda}{\rho} - \frac{4\rho^2 k^2}{(A^2 - k^2\rho^2)\rho}\right]\frac{dM}{d\rho},\tag{7.16}$$

onde A é uma constante, a saber,

$$A = 2\sqrt{\lambda + 1},\tag{7.17}$$

na aproximação $\rho \ll 1$ temos $k^2 \rho^2 \approx 0$ assim a expressão anterior se torna aproximadamente,

$$2\frac{dM}{d\rho}\frac{d}{d\rho}\ln J_{\lambda}(k\rho) \approx \frac{2\lambda}{\rho}\frac{dM}{d\rho},\tag{7.18}$$

substituindo este resultado na equação (7.14) e já considerando a massa $m_0 = 1/2$, esta equação adquire então uma forma mais simples,

$$\frac{d^2M}{d\rho^2} + \frac{(1+2\lambda)}{\rho}\frac{dM}{d\rho} - \frac{3}{2M}\left(\frac{dM}{d\rho}\right)^2 - 2ME_n(M-1) = 0, \qquad (7.19)$$

vamos considerar agora o termo não-linear $\frac{3}{2M} \left(\frac{dM}{d\rho}\right)^2$, considere também a seguinte transformação,

$$Z(\rho) = -\frac{3}{2} \ln M(\rho), \qquad (7.20)$$

por meio desta transformação a equação (7.19) torna se,

$$\frac{d^2 Z}{d\rho^2} + \frac{(1+2\lambda)}{\rho} \frac{dZ}{d\rho} + 3E_n(e^{-2Z/3} - 1) = 0,$$
(7.21)

expandindo $e^{-2Z/3}\approx 1-2Z/3,$ já que estamos utilizando a aproximação $\rho\ll 1,$ temos,

$$\frac{d^2 Z}{d\rho^2} + \frac{(1+2\lambda)}{\rho} \frac{dZ}{d\rho} + 2E_n Z = 0,$$
(7.22)

esta equação pode ser resolvida analiticamente em termos de funções de Bessel. Se desconsiderarmos a função de Neumann, por não ser regular na origem, a solução geral é,

$$Z(\rho) = \frac{C}{\rho^{\lambda}} J_{\lambda} \left(-i\sqrt{2E_n}\rho \right), \qquad (7.23)$$

e usando a transformação (7.20) obtemos uma expressão para a massa $M_{\lambda}(\rho)$ no limite de valores pequenos de ρ ,

$$M_{\lambda}(\rho) \approx 1 - \frac{2}{3} \left[\frac{C}{\rho^{\lambda}} J_{\lambda} \left(-i\sqrt{2E_n}\rho \right) \right],$$
 (7.24)

utilizando as condições iniciais $M(\rho_i) = 1/2$ e $M'(\rho_i) = 0$ para $\rho_i = 0,01$, temos,

$$M_{\lambda}(\rho) \approx 1 - \frac{1}{2} \frac{10^{-2\lambda}}{I_{\lambda}(-0,01\sqrt{2E_n})} \left[\frac{1}{\rho^{\lambda}} I_{\lambda} \left(-\sqrt{2E_n}\rho \right) \right], \qquad (7.25)$$

onde $I_{\lambda}(z)$ é a função de Bessel modificada de ordem λ . Portanto, podemos obter aproximadamente uma distribuição de massa M, que é uma solução para a equação radial (7.22). Em suma, essa distribuição de massa nos permite obter um modelo análogo de uma partícula escalar e neutra, de massa constante e restrita a se mover em uma superfície cônica, se considerarmos valores para a coordenada radial ρ muito menores que a unidade.



Figura 7.4: Comparação entre a solução numérica exata e a solução analítica aproximada da equação (7.14) para $\lambda = 0$ ($\alpha = 1/2$, a = 1, n = 0). as condições iniciais são $M(\rho_i) = 1/2$ e $M'(\rho_i) = 0$ para $\rho_i = 0.01$. Podemos observar que, considerando $\rho \ll 1$, as duas soluções correspondem. Usamos unidades onde $\hbar = 2m_0 = 1$.

7.5 Conclusão

Neste capítulo estudamos o mapeamento exato entre uma partícula quântica escalar e neutra, não-relativística, restrita a se mover em uma superfície cônica (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo). Substituímos a função de onda exata do sistema alvo na equação de Schrödinger livre PDM, obtendo uma EDP não-linear para a distribuição de massa M. Considerando somente uma dependência radial, o problema se resume a resolver uma EDO não-linear, de onde pudemos obter numericamente as soluções radiais, bem como as curvas dos potenciais efetivos associados. Os resultados foram apresentados graficamente nas Fig. 7.2 - 7.3. Por fim, implementamos uma aproximação na EDO considerando $\rho << 1$, o que nos permitiu obter uma solução analítica aproximada para a distribuição de massa M. A solução analítica aproximada e a solução numérica exata podem ser comparadas na Fig. 7.4. Os resultados apresentados nas Fig. 7.2 - 7.4 **representam o nosso modelo análogo para o sistema alvo composto por uma partícula neutra vinculada ao espaço cônico**. O conteúdo deste capítulo foi publicado na referência [86].

Capítulo 8

Conclusões e Perspectivas Futuras

8.1 Conclusões

Apresentamos nesta tese um estudo sobre modelos análogos utilizando mapeamentos aproximados e principalmente sobre mapeamentos exatos entre alguns sistemas físicos, que ainda não foram realizados experimentalmente, nem observados na natureza (sistemas alvo) e sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição (abreviados como sistemas quânticos PDM, os quais são o nossos modelos análogos). Uma introdução foi apresentada e no capítulo 2 apresentamos cronologicamente os diversos Hamiltonianos cinéticos para sistemas PDM. Reservamos uma atenção especial ao Hamiltoniano de von Roos, já que este operador seria utilizado posteriormente ao longo de todo o trabalho. Vimos também o critério de Dutra e Almeida, muito importante na seleção de ordenamentos fisicamente admissíveis.

No capítulo 3 estudamos o sistema carga-monopolo não-relativístico em um contexto envolvendo uma massa efetiva dependente de posição e resolvemos o problema para uma distribuição de massa dada por (3.2). As funções de onda angulares são as mesmas do sistema carga-monopolo com massa constante, os chamados harmônicos esféricos de monopolo $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$, e as funções de onda radiais são funções de Bessel esféricas. Como ambos os sistemas — carga-monopolo com massa constante e carga na ausência de um monopolo, mas com massa efetiva dependente da posição — possuem funções radiais semelhantes, procuramos por condições, tanto na ordem das funções quanto em intervalos da variável r, que poderiam tornar ambas as funções de onda aproximadamente iguais. Alguns resultados estão resumidos na tabela 3.1. Finalmente, e surpreendentemente, perguntamos à própria equação de Schrödinger livre PDM qual distribuição de massa poderia reproduzir exatamente as funções de onda de Wu-Yang para o sistema carga-monopolo. A distribuição de massa M satisfaz uma EDP não-linear, onde consideramos separadamente uma dependência angular e uma radial. Esta suposição deu origem a duas EDO não-lineares, as quais foram resolvidas numericamente. As soluções destas EDO apresentam a característica física esperada perto da origem e a partir destas soluções determinamos também os potenciais efetivos. Ilustramos nossos resultados nas figuras 3.3 - 3.13.

No capítulo 4 introduzimos um mapeamento exato entre o sistema cargadyon (sistema alvo) e um sistema quântico PDM (modelo análogo) nos regimes não-relativístico e relativístico. No primeiro caso substituímos a solução exata (4.4) na equação de Schrödinger livre PDM para obter a EDP nãolinear (6.1) para a distribuição de massa, considerando apenas uma dependência radial, resolvemos essa equação numericamente e apresentamos os resultados graficamente. O tratamento para o caso relativístico é bastante similar, porém ao invés de usar a equação de Schrödinger, usamos a equação de Klein-Gordon PDM (4.17). O problema do ordenamento não ocorre por causa da ausência do produto entre os operadores massa e momento. Este último caso é então mais direto e nos dá uma expressão analítica para a distribuição de massa $m(r, \theta)$. O gráfico desta solução é mostrada na Fig. 4.4 e na Fig. 4.5 temos a mesma solução, porém incorporando a construção de Wu-Yang. Na tabela 4.1 apresentamos um sumário dos nossos resultados.

No capítulo 5 estudamos o sistema carga-monopolo não-relativístico com spin-1/2 (sistema alvo) via equação de Pauli livre PDM e introduzimos um mapeamento exato entre este sistema e um sistema quântico PDM (modelo análogo). Apresentamos então a equação de Pauli livre PDM e substituímos a solução exata para o sistema carga-monopolo nesta equação, obtendo um sistema desacoplado com duas EDP não-lineares para a distribuição de massa M. Tratamos somente o mapeamento para o caso onde os autovalores do operador J iniciam do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ (tipo 3) e considerando apenas uma dependência radial, obtemos um sistema desacoplado com duas EDO não-lineares. Levando em conta a condição aproximada (5.16), que é necessária para que a solução de ambas as EDO do sistema sejam aproximadamente as mesmas, resolvemos o sistema numericamente e apresentamos graficamente as soluções (distribuições de massa M), bem como os potenciais efetivos associados. Assim, ilustramos nossos resultados nas figuras 5.1 - 5.4. As curvas referentes às soluções radiais para alguns autovalores de energia distintos são mostradas na Fig. 5.3 e as curvas para alguns valores do ângulo θ_0 , variando de 30° a 145° são mostradas na Fig. 5.4.

No capítulo 6 demos prosseguimento ao trabalho desenvolvido no capítulo 5 e estudamos o sistema carga-dyon não-relativístico (sistema alvo) via equação de Pauli PDM, construindo também o mapeamento exato em um sistema quântico PDM (modelo análogo). O procedimento é idêntico ao caso anterior, isto é, substituímos a solução exata do sistema carga-dyon na equação de Pauli livre PDM, obtendo um sistema desacoplado com duas EDP nãolineares (6.1) para a distribuição de massa M. Assim, conforme foi feito no capítulo 5, tratamos o caso em relação aos autovalores do operador \vec{J} , iniciando do valor mínimo $j = \mu - 1/2$ (tipo 3). Considerando apenas uma dependência radial e novamente a condição (6.11), resolvemos as EDO numericamente e apresentamos os resultados graficamente, bem como as curvas dos potenciais efetivos associados. Ilustramos nossos resultados nas figuras 6.1- 6.3. Na Fig. 6.3 comparamos as distribuições para o sistema cargamonopolo (n = 0) e para o sistema carga-dyon (n = -1800).

No capítulo 7 estudamos uma partícula quântica escalar e neutra, nãorelativística, restrita a se mover em uma superfície cônica (sistema alvo) e como poderíamos reproduzir esta dinâmica utilizando um sistema quântico PDM (modelo análogo). Usando a equação de Schrödinger livre PDM, substituímos a função de onda exata do sistema alvo e obtivemos uma EDP não-linear para a distribuição de massa M. Considerando por simplicidade somente uma dependência radial $M = M(\rho)$, resolvemos numericamente a EDO resultante e apresentamos os resultados graficamente, bem como as curvas dos potenciais efetivos associados. Os resultados estão apresentados nas figuras 7.2-7.3. Para concluir o capítulo, implementamos uma aproximação na EDO considerando $\rho << 1$, o que nos permitiu obter uma solução analítica aproximada para a distribuição de massa M, A solução numérica exata e a solução analítica aproximada podem ser comparadas na Fig. 7.4.

A técnica desenvolvida ao longo desta tese poderia servir como base para levar a um modelo experimental, usando um sistema controlado em matéria condensada, o qual poderia ser utilizado para simular alguns sistemas físicos em laboratório. Assim, como um último comentário, podemos afirmar que o potencial efetivo, o qual foi determinado para cada mapea-

Sistema alvo	Modelo análogo	Autores / ano
Carga-monopolo	Sistemas quânticos PDM	A. Schmidt, A. de Jesus / 2018 [73]
Carga-dyon	Sistemas quânticos PDM	A. de Jesus, A. Schmidt / 2019 [74]
Carga-dyon relativístico	Sistemas quânticos PDM	A. de Jesus, A. Schmidt / 2019 [74]
Carga-monopolo com spin $1/2$	Sistemas quânticos PDM	A. de Jesus, A. Schmidt / Submetido
Carga-dyon com spin $1/2$	Sistemas quânticos PDM	A. de Jesus, A. Schmidt / Submetido
Espaço cônico	Sistemas quânticos PDM	A. de Jesus, A. Schmidt / 2019 [86]

Tabela 8.1: Resumo dos sistemas alvo e seus modelos análogos (sistemas quânticos PDM), os quais foram objetivo central da tese. Também são apresentados seus respectivos autores e ano de publicação.

mento não-relativístico, proporciona uma maneira de realizar os modelos análogos dos sistemas alvo apresentados em nosso trabalho. Uma possível sugestão para uma implementação experimental poderia ser a técnica conhecida como *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) [84, 85], uma poderosa técnica experimental utilizada principalmente para o crescimento de camadas semicondutoras de alta qualidade e deposição de filmes finos e ultrafinos. Esta técnica é utilizada basicamente na construção de dispositivos e na pesquisa básica.

Para finalizar o nosso trabalho, vamos reunir os modelos análogos construídos e investigados ao longo desta tese em uma tabela, a exemplo do que foi feito na tabela 1.1. Assim, apresentamos o resultado geral da tese, que está resumido na tabela 8.1.

8.2 Perspectivas Futuras

Como trabalho futuro pretendemos realizar o mapeamento exato dos sistemas carga-monopolo e carga-dyon relativísticos utilizando a equação de Dirac. Uma tentativa de construir o mapeamento com a equação de Dirac, com o uso das autofunções de um sistema carga-monopolo e com o potencial vetor de Dirac, foi realizada e não conduziu a resultados fisicamente aceitáveis. Desta forma, pretendemos investigar tal mapeamento utilizando potenciais vetoriais associados a monopolos não-abelianos, como por exemplo o monopolo de Wu-Yang com simetria SU(2).

Também daremos prosseguimento ao estudo dos mapeamentos no contexto da teoria do espalhamento, trabalhando com a equação de Lippmann-Schwinger em um cenário envolvendo massa efetiva dependente da posição.

Pretendemos também construir mapeamentos utilizando outros ordenamentos admissíveis pelo critério de Dutra e Almeida [4], como por exemplo o ordenamento de Mustafa e Mazharimousavi [6]. É importante comentar que outros sistemas quânticos aparentemente não-realizáveis em laboratório podem ser investigados à luz do modelo teórico do mapeamento exato, proposto e desenvolvido na presente tese.

Pretende-se investigar mais a fundo mapeamentos, em regimes relativísticos e não-relativísticos, de sistemas quânticos compostos por dois dyons interagentes e considerar o spin nestes sistemas. Uma estrutura mais complexa envolvendo monopolos magnéticos e dyons (abelianos e não-abelianos) desperta certo interesse e um mapeamento destes sistemas poderia revelar resultados interessantes e promissores.

Por fim pretendemos investigar possíveis aplicações de sistemas quânticos PDM e do modelo proposto na presente tese no campo da informação quântica.

Apêndice A

Potencial vetor para o monopolo de Dirac

Neste apêndice vamos construir o potencial vetor de Dirac \vec{A} . Podemos iniciar esta tarefa partindo da expressão para um campo magnético radial \vec{B} tipo Coulombiano,

$$\vec{B} = g \frac{\vec{r}}{r^3},\tag{A.1}$$

onde g é a carga magnética do monopolo. O campo magnético radial \vec{B} é o campo esperado para um monopolo magnético pontual e precisa ser definido como o rotacional de um potencial vetor \vec{A} , isto é,

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A},\tag{A.2}$$

pela lei de Gauss, o resultado para o fluxo do campo magnético de um monopolo com carga magnética g deveria ser,

$$\Phi = \oint_{A} \vec{B} \cdot \hat{n} ds = 4\pi g, \qquad (A.3)$$

entretanto, utilizando (A.2) concluímos também que,

$$\Phi = \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0, \qquad (A.4)$$

o que contraria (A.3), logo temos um problema na definição inicial para o campo \vec{B} do monopolo, o que conduz a um paradoxo! Podemos contudo contornar esta situação considerando um termo extra no campo radial \vec{B} , este termo é o campo magnético associado com a chamada corda de Dirac e será definido como [34],

$$\vec{B}_c = -4\pi g \theta(z) \delta(x) \delta(y) \hat{n}, \tag{A.5}$$

onde $\theta(z)$ é a função degrau e $\delta(x)$, $\delta(y)$ são as funções delta de Dirac. Assim, o campo magnético calculado a partir do potencial vetor \vec{A} deverá ser,

$$\vec{B}_s = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} + \vec{B}_c, \tag{A.6}$$

um cálculo relativamente simples mostra que campo magnético $\vec{B_s}$ obedece à condição (A.4), isto é,

$$\Phi = \oint_{A} (\vec{B} + \vec{B}_{c}) \cdot \hat{n} ds = 4\pi g - 4\pi g \theta(0) = 0, \qquad (A.7)$$

desta forma, o campo magnético radial \vec{B} de um monopolo magnético pontual é dado por $\vec{B} = \vec{B}_s - \vec{B}_c$ e pode se mostrar facilmente que tal campo obedece à condição (A.3). O potencial vetor magnético \vec{A} é então associado ao campo \vec{B}_s e não ao campo \vec{B} . Uma representação pictórica do campo magnético \vec{B} do monopolo magnético pontual como sendo a combinação do campo \vec{B}_s (associado ao potencial vetor \vec{A}) com o campo devido a uma corda de Dirac \vec{B}_c é mostrada na Fig. A.1.

Vamos partir agora para a construção da expressão do potencial vetor \vec{A} . Como o campo \vec{B}_s é radial e vem de um produto vetorial, podemos fazer algumas hipóteses acerca de \vec{A} :

1 - \vec{A} depende do ângulo polar θ .

2 - \vec{A} aponta na direção do gradiente de $\phi(x, y)$, que é o ângulo azimutal em função de x e y.



Figura A.1: Representação pictórica do campo magnético radial $\vec{B} = \vec{B}_s - \vec{B}_c$ devido a um monopolo magnético pontual. O campo \vec{B}_s contém um solenóide semi-infinito no eixo z negativo, este representa a corda de Dirac, a qual é cancelada pelo solenóide com fluxo oposto, à direita. Retirada da Ref. [87]

Assim, uma forma conveniente para \vec{A} seria,

$$\vec{A} = A(\theta) \vec{\nabla} \phi(x, y),$$
 (A.8)

a função $\phi(x,y)$ pode ser obtida das relações entre coordenadas esféricas e cartesianas, então,

$$\tan \phi = \frac{y}{x} \quad \rightarrow \quad \phi(x, y) = \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad (A.9)$$

o gradiente de ϕ é,

$$\vec{\nabla}\phi = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\hat{x} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\hat{y},\tag{A.10}$$

uma proposta conveniente para a função $A(\theta)$ (ansatz) é,

$$A(\theta) = g(1 - \cos \theta), \tag{A.11}$$

onde a constante g será associada à carga magnética do monopolo. Logo temos,

$$\vec{A} = -\frac{g(1 - \cos\theta)\sin\phi}{r\sin\theta}\hat{x} + \frac{g(1 - \cos\theta)\cos\phi}{r\sin\theta}\hat{y}, \qquad (A.12)$$

utilizando as relações entre os vetores de base $\hat{x} \in \hat{y}$ e os vetores de base $\hat{r}, \hat{\theta}$ e $\hat{\phi}$, isto é,

$$\hat{x} = \sin \theta \cos \phi \hat{r} + \cos \theta \cos \phi \hat{\theta} - \sin \phi \hat{\phi}$$
(A.13)
$$\hat{y} = \sin \theta \sin \phi \hat{r} + \cos \theta \sin \phi \hat{\theta} + \cos \phi \hat{\phi},$$

substituindo estas relações em (A.15) e efetuando alguns cálculos, chegamos na seguinte expressão,

$$\vec{A} = \frac{g(1 - \cos\theta)\sin\phi}{r\sin\theta} (-\sin\phi\sin\theta\cos\phi + \cos\phi\sin\theta\sin\phi)\hat{r} + \frac{g(1 - \cos\theta)\cos\phi}{r\sin\theta} (-\sin\phi\cos\theta\cos\phi + \cos\phi\cos\theta\sin\phi)\hat{\theta} + \frac{g(1 - \cos\theta)\cos\phi}{r\sin\theta} (\sin^2\phi + \cos^2\phi)\hat{\phi},$$
(A.14)

os primeiros dois termos entre parênteses (multiplicando $\hat{r} \in \hat{\theta}$) são nulos, o termo multiplicando $\hat{\phi}$, pela relação fundamental da trigonometria, é igual a 1. Logo, temos o nosso resultado final para o potencial vetor \vec{A} ,

$$\vec{A} = \frac{g(1 - \cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\phi},\tag{A.15}$$

com $r \neq 0$. Este é o chamado potencial vetor de Dirac para o monopolo magnético. A expressão (A.15) pode ser definida mais corretamente como uma distribuição do que como uma função. O domínio de (A.15) possui um conjunto de singularidades em $\theta = \pi$, ao longo do semi-eixo z negativo, que é a chamada corda de Dirac. A posição da corda no espaço é arbitrária e duas cordas em posições diferentes são relacionadas por uma simples transformação de calibre.

Apêndice B

Solução exata para o sistema quântico carga-monopolo

Neste apêndice determinaremos a autofunção exata para um sistema quântico composto por uma partícula escalar e carregada, interagindo com um monopolo de Dirac localizado na origem. Esta solução também é chamada solução de Wu-Yang para o sistema carga-monopolo [33, 34]. Vamos apresentar a equação de Schrödinger para uma partícula escalar interagindo com um campo magnético monopolar. Iniciaremos a análise relembrando que na mecânica quântica esta interação é descrita pela derivada covariante,

$$D\psi = (\vec{\nabla} - ie\vec{A})\psi, \tag{B.1}$$

a equação de Schrödinger para uma partícula de massa constante m interagindo com um campo magnético externo é,

$$-\frac{1}{2m}(\vec{\nabla} - ie\vec{A})^2\psi = E\psi, \qquad (B.2)$$

usando coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) e usando a expressão para o potencial vetor de Dirac (A.15), podemos escrever a equação (B.2) em uma forma mais explícita,

$$-\frac{1}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + L^2 - \mu^2 \right] \psi = E\psi, \qquad (B.3)$$

onde o quadrado do operador momento angular é dado pela seguinte expressão,

$$L^{2} = -\frac{1}{\sin^{2}\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial\phi} - i\mu[1 - \cos\theta] \right)^{2} \right] + \mu^{2}, \quad (B.4)$$

a equação (B.3) pode ser resolvida pela técnica de separação de variáveis. Podemos escrever então a função de onda ψ como um produto de duas funções,

$$\psi(r,\theta,\phi) = F_{\ell}(r)Y_{\mu lm}(\theta,\phi), \qquad (B.5)$$

aqui consideramos a função $Y_{\mu lm}(\theta, \phi)$, porque as duas partes angulares não se desacoplam, devido à presença do termo μ . A parte radial resulta em uma equação de Bessel esférica,

$$-\frac{1}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1) - \mu^2}{r^2} \right] F_{\ell} = EF_{\ell}, \tag{B.6}$$

a qual é satisfeita pelas funções de Bessel esféricas,

$$F_{\ell}(r) = \sqrt{\frac{k}{r}} J_{\ell+1/2}(kr) \tag{B.7}$$

onde $k = \sqrt{2mE}$, com E > 0. O espectro de autovalores de energia aqui é contínuo, visto que o sistema composto por uma partícula carregada e um monopolo magnético não forma estados ligados. O índice ℓ é dado por,

$$\ell = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \mu^2} - \frac{1}{2},$$
(B.8)

a equação angular utiliza o operador L^2 e é escrita como,

$$L^2 Y_{\mu lm} = l(l+1)Y_{\mu lm}, (B.9)$$

a soluções desta equação são conhecidas como harmônicos esféricos generalizados ou harmônicos de monopolo [33, 34] e são dadas pela expressão,

$$Y_{\mu lm}(\theta,\phi) = N \frac{P_{l+m}^{(-\mu-m,-\mu+m)}(\cos\theta) \exp[i(m+\mu)\phi]}{(1-\cos\theta)^{(\mu+m)/2}(1+\cos\theta)^{(\mu-m)/2}},$$
(B.10)

onde $P_n^{(a,b)}(\cos \theta)$ são os chamados polinômios de Jacobi; No caso particular em que $\mu = 0$, estas funções reduzem-se aos harmônicos esféricos usuais. A constante de normalização N é,

$$N = 2^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!(l+m)!}{4\pi(l-\mu)!(l+\mu)!}}.$$
(B.11)

Assim, o sistema carga-monopolo possui uma parte radial dada pelas funções de Bessel esféricas e uma parte angular dada pelos harmônicos de monopolo. O sistema carga-dyon compartilha da mesma parte angular deste sistema, diferindo somente na parte radial, que é dada em termos da função hipergeométrica confluente $_1F_1$. Os dois formalismos entretanto correspondem para Q = 0, onde Q é a carga elétrica do dyon.

Apêndice C

Aproximação de massa efetiva

Na física do estado sólido, principalmente na física dos semicondutores, os portadores de carga (elétrons ou buracos) na banda de condução de um cristal estão sujeitos a um potencial periódico U devido ao íons da rede cristalina e o movimento destas partículas é influenciado por este potencial periódico.

Considerando então o elétron (ou buraco) em uma rede cristalina, uma importante construção é a da aproximação da massa efetiva m^* . Assim, neste ambiente, um elétron (ou buraco) sujeito a uma força F produzida pelo potencial periódico U se comporta como se estivesse no espaço livre, contudo com uma massa diferente da massa de repouso do elétron m_e . Os efeitos da rede cristalina sobre o movimento destes portadores de carga estão todos contidos na chamada relação de dispersão E(k), que para um elétron no espaço livre é simplesmente dada pela energia cinética,

$$E(k) = \frac{k^2}{2m_e} \tag{C.1}$$

Para um elétron (ou buraco) se movendo em uma rede cristalina, a sua massa efetiva m^* poderá ser determinada por meio da relação de dispersão para este meio cristalino.

Vamos considerar, por simplicidade, um problema unidimensional. A velocidade de grupo de um pacote de ondas pode ser dada por,

$$v_g = \frac{dE}{dk} \tag{C.2}$$

a força no pacote de ondas, produzida pelo potencial periódico U, é,

$$F = \frac{dk}{dt} \tag{C.3}$$

a aceleração no pacote de ondas produzida pela força F é,

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{d}{dt}\frac{dE}{dk} = \frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt}$$
(C.4)

então, combinando as equações (C.3) e (C.4), temos,

$$F = \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1} \frac{dv_g}{dt},\tag{C.5}$$

o que nos permite definir a massa efetiva m^* do elétron (ou buraco),

$$m^* = \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1}.$$
 (C.6)

Assim, definimos a massa efetiva m^* como o inverso da derivada segunda da relação de dispersão E(k) com relação a k. Se considerarmos o caso tridimensional, onde os números de onda k_i não são necessariamente os mesmos em todas as direções, a massa efetiva m^* é definida como um tensor de segunda ordem,

$$m_{ij}^* = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}\right)^{-1}.$$
 (C.7)

Este tensor é conhecido como o tensor de massa efetiva m_{ij}^* . Os efeitos do potencial periódico cristalino estão expressos neste tensor e terão influência na dinâmica dos elétrons (ou buracos). O tensor de massa efetiva e seu inverso são simétricos. O caso mais simples é aquele onde as massas efetivas nas três direções são todas iguais, este é o caso dado pela expressão (C.6).
Referências Bibliográficas

- O. von Roos, Position-dependent effective masses in semiconductor theory, Phys. Rev. B 27, 7547 (1983).
- [2] S. Q. Shen, Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters, Berlin: Springer (2012).
- [3] J.-M. Lévi-Leblond, Position-dependent effective mass and Galilean invariance, Phys. Rev. A 52 1845 (1995).
- [4] A. S. Dutra, C. A. S. Almeida, Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses, Phys. Lett. A 275, 25 (2000).
- [5] Q.-G. Zhu, H. Kroemer, Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors, Phys. Rev. B 27, 3519 (1983).
- [6] O. Mustafa, S. H. Mazharimousavi, Ordering Ambiguity Revisited via Position Dependent Mass Pseudo-Momentum Operators, Int. J. Theor. Phys. 46, 1786 (2007).
- [7] A. G. M. Schmidt, A. D. Azeredo, A. Gusso, Quantum wave packet revival in two-dimensional circular quantum wellswith position-dependent mass, Phys. Lett. A 372, 2774 (2008).

- [8] R. Koç, M. Koca, G. Şahinoğlu, Scattering in abrupt heterostructures using a position dependent mass Hamiltonian, Eur. Phys. J. B 48, 583 (2005).
- [9] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano, A. O. Gogolin, Rashba coupling in quantum dots: An exact solution, Phys. Rev. B 70, 115316 (2004).
- [10] A. Çetin, A quantum pseudodot system with a two-dimensional pseudoharmonic potential, Phys. Lett. A372, 3852 (2008).
- B.K. Pal, B. Roy, B. Basu, Quantum dot with spin-orbit interaction in noncommutative phase space and analog Landau levels Phys. Lett. A 374,4369 (2010).
- [12] V. V. Kudryashov, Exact Wave Functions of Electron in a Quantum Dot with Account of the Rashba Spin-Orbit Interaction, Nonlinear Phenomena in Complex Systems 12, 199 (2009).
- [13] A. Keshavarz, N. Zamani, Optical properties of spherical quantum dot with position-dependent effective mass, Superlattices and Microstructures, 58, 191 (2013).
- [14] A. D. Alhaidari, Nonrelativistic Green's Function for Systems With Position-Dependent Mass, Int. J. Theor. Phys. 42, 2999 (2003).
- [15] S. Zhang, D. A. Genov, C. Sun, X. Zhang, Cloaking of Matter Waves, Phys. Rev. Lett. 100, 123002 (2008).
- [16] D. Bonatsos, P. E. Georgoudis, D. Lenis, N. Minkov, C. Quesne, Bohr Hamiltonian with a deformation-dependent mass term for the Davidson potential, Phys. Rev. C 83, 044321 (2011).

- [17] A. G. M. Schmidt, Wave-packet revival for the Schrödinger equation with position-dependent mass, Phys. Lett. A 353, 459 (2006).
- [18] A. G. M. Schmidt, Squeezing a wave packet with an angular-dependent mass, J. Phys. A 42, 245304 (2009).
- [19] B. G. da Costa, E.P. Borges, A position-dependent mass harmonic oscillator and deformed space, J. Math. Phys. 59, 042101 (2018).
- [20] A. G. M. Schmidt, Time evolution for harmonic oscillators with position-dependent mass, Phys. Scr. 75, 480 (2007).
- [21] Y. Hamdouni, Motion of position-dependent mass as a dampingantidamping process: Application to the Fermi gas and to the Morse potential, J. Phys. A 44, 385301 (2011).
- [22] S. Yao, X. Zhou, G. Hu, Experimental study on negative effective mass in a 1D mass-spring system, New. J. Phys. 10, 043020 (2008).
- [23] J. Yu, S.-H. Dong, G.-H. Sun, Series solutions of the Schrödinger equation with position-dependent mass for the Morse potential, Phys. Lett. A 322, 290 (2004).
- [24] J. Yu and S.-H. Dong, Exactly solvable potentials for the Schrödinger equation with spatially dependent mass, Phys. Lett. A 325, 194 (2004).
- [25] S.-H. Dong and M. Lozada-Cassou, Exact solutions of the Schrödinger equation with the position-dependent mass for a hard-core potential, Phys. Lett. A 337, 313 (2005).
- [26] S.-H. Dong, J. J. Peña, C. Pacheco-Gracía and J. Gracía-Ravelo, Algebraic approach to the position-dependent mass Schrödinger equation for a singular oscillator, Mod. Phys. Lett. A 22, 1039 (2007).

- [27] G. A. Marques, V. B. Bezerra and S.- H. Dong, Solution of the dirac equation with position-dependent mass in a coulomb and scalar fields in a conical spacetime, Mod. Phys. Lett. A 28 (31), 1350137 (2013).
- [28] A. S. Dutra, J. A. de Oliveira, Two-dimensional position-dependent massive particles in the presence of magnetic fields, J. Phys. A 42, 025304 (2009).
- [29] P. A. M. Dirac, Quantised singularities in the electromagnetic field,, Proc. Roy. Soc. A 133, 60 (1931).
- [30] J. Preskill, Magnetic Monopoles, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 34, 461 (1984).
- [31] F. A. B. Rangel, G. T. C. da Silva, J. A. Helayël-Neto, An Alternative Approach to the Electric Charge Quantization with Non-global Potentials, Braz. J. Phys. 42, 120 (2012).
- [32] T. T. Wu, C. N. Yang, Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields, Phys. Rev. D 12 3845 (1975).
- [33] T. T. Wu, C. N. Yang, Dirac monopole without strings: Monopole harmonics, Nucl. Phys. B 107, 365 (1976).
- [34] Ya. M. Shnir, *Magnetic Monopoles*, Springer-Verlag (2005).
- [35] K. Moriyasu, An Elementary Primer for Gauge Theory, World Scientific (1983).
- [36] P. Rossi, Exact results in the theory of non-Abelian magnetic monopoles, Phys. Rep. 86, 317 (1982).

- [37] C. Castelnovo, R. Moessner, S. L. Sondhi, Magnetic monopoles in spin ice, Nature 451, 42 (2008).
- [38] D. J. P. Morris, D. A. Tennant, S. A. Grigera, B. Klemke, C. Castelnovo,
 R. Moessner, C. Czternasty, M. Meissner, K. C. Rule, J.-U. Hoffmann,
 K. Kiefer, S. Gerischer, D. Slobinsky, R. S. Perry, *Dirac string and* magnetic monopoles in the spin ice Dy2Ti2O7, Science 326, 411 (2009).
- [39] H. M. Revell, L. R. Yaraskavitch, J. D. Mason, K. A. Ross, H. M. L. Noad, H. A. Dabkowska, B. D. Gaulin, P. Henelius, and J. B. Kycia, *Evidence of impurity and boundary effects on magnetic monopole dynamics in spin ice*, Nat. Phys. 9, 34 (2013).
- [40] M. W. Ray, E. Ruokokoski, K. Tiurev, M. Möttönen, D. S. Hall, Observation of isolated monopoles in a quantum field, Science 348, 544 (2015).
- [41] M. W. Ray, E. Ruokokoski, S. Kandel, M. Möttönen, D. S. Hall, Observation of Dirac monopoles in a synthetic magnetic field, Nature 505, 657 (2014).
- [42] N. Kanazawa, Y. Nii, X.-X. Zhang, A.S. Mishchenko, G. de Filippis, F. Kagawa, Y. Iwasa, N. Nagaosa, Y. Tokura, *Critical phenomena of emergent magnetic monopoles in a chiral magnet*, Nat. Comm. 7, 11622-1 (2016).
- [43] J. Wang, S. Qu, Z. Xu, A. Zhang, H. Ma, J. Zhang, H. Chen, M. Feng, Magnetic monopole-like response in metamaterials, Photonics and Nanostructures 12, 429 (2014).
- [44] A. Béché, R. van Boxem, G. van Tendeloo, J. Verbeeck, Magnetic monopole field exposed by electrons, Nature Phys. 10, 26 (2014).

- [45] K. Bendtz, D. Milstead, H.-P. Hächler and A. M. Hirt, P. Mermod, P. Michael, T. Sloan, C. Tegner, S. B. Thorarinsson, *Search for Magnetic Monopoles in Polar Volcanic Rocks*, Phys. Rev. Lett. **110**, 121803 (2013).
- [46] J. Moody, A. Shapere, F. Wilczek, Realizations of magnetic-monopole gauge fields: diatoms and spin precession, Phys. Rev. Lett. 56, 893 (1986).
- [47] K. Tiurev, P. Kuopanportti, M. Möttönen, Creation of a Dirac monopole-antimonopole pair in a spin-1 Bose-Einstein condensate, Phys. Rev. A 99, 023621 (2019).
- [48] J. Schwinger, A magnetic model of matter, Science 165, 3895 (1969).
- [49] J. S. Dowker, *Quantum field theory on a cone*, J. Phys. A **10**, 115 (1977)
- [50] J. S. Dowker, Thermal properties of Green's functions in Rindler, de Sitter, and Schwarzschild spaces, Phys. Rev. D 18, 1856 (1978).
- [51] F. M. Andrade, E. O. Silva, M. Pereira, Physical regularization for the spin-1=2 Aharonov-Bohm problem in conical space, Phys. Rev. D 85, 041701 (2012).
- [52] C. Sátiro, F. Moraes, Lensing effects in a nematic liquid crystal with topological defects, Eur. Phys. J. E 20, 173 (2006).
- [53] M. O. Katanaev, I. V. Volovich, Theory of defects in solids and threedimensional gravity, Ann. Phys. 216,1 (1992).
- [54] E. S. Moreira, Jr., E. S. Oliveira, Specific heat of a particle on the cone, Phys. Rev. A 73, 052105 (2006).

- [55] C. Filgueiras, F. Moraes, On the quantum dynamics of a point particle in conical space, Ann. Phys. 323, 3150 (2008).
- [56] K. Kowalski, J. Rembielinski, On the dynamics of a particle on a cone, Ann. Phys. 329,146-157 (2013).
- [57] C. Filgueiras, E. O. Silva, F. M. Andrade, Nonrelativistic quantum dynamics on a cone with and without a constraining potential, J. Math. Phys. 53, 122106 (2012).
- [58] E. S. Moreira, Jr., Aspects of classical and quantum motion on a flux cone, Phys. Rev. A 58, 1678 (1998).
- [59] A.Sommerfeld, Zur Elektronentheorie der Metalle, Die Naturwissenschaften, 15, 825 (1927).
- [60] H.Bethe, Theorie der Beugung von Elektronen an Kristallen, Ann. Phys., 87 55 (1928).
- [61] E.H. Hall, Sommerfeld's Electron-Theory of metals, Proc. Nat. Acad. Sci. 14, 370 (1928).
- [62] D.J. BenDaniel, C.B. Duke, Space-Charge Effects on Electron Tunneling, Phys. Rev., 152, 683 (1966).
- [63] T. Gora, F. Williams, Theory of Electronic States and Transport in Graded Mixed Semiconductors, Phys. Rev. 177, 1179 (1969).
- [64] F.S.A. Cavalcante, R.N. Costa Filho, J.R. Filho, C.A.S. de Almeida, V.N. Freire, Form of the quantum kinetic-energy operator with spatially varying effective mass, Phys. Rev. B, 55, 1326 (1997).

- [65] R.A. Morrow, K.R. Brownstein, Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions, Phys. Rev. B, 30, 678 (1984).
- [66] T.L. Li, K.J. Kuhn, Band-offset ratio dependence on the effective-mass Hamiltonian based on a modified profile of the GaAs – Al_xGa_{1-x} As quantum well, Phys. Rev. B, 47, 12760 (1993).
- [67] J.Sá Borges, L.N. Epele, H. Fanchiotti, C.A.Garcia Canal, F.R.A. Simão, Quantization of a particle with a force quadratic in the velocity, Phys. Rev. A 38, 3101 (1988).
- [68] C. Quesne, First-order intertwining operators and position-dependent mass Schrödinger equations in d dimensions, Ann. Phys. 321, 1221 (2006).
- [69] I. Bialynicki-Birula, Relativistic Quantum Mechanics of Dyons. Exact Solution, Phys. Rev. D, 3, 2413 (1971).
- [70] C. Isham, Modern Differential Geometry for Physicists, World Scientific (2001).
- [71] A. G. M. Schmidt, L. Portugal, A. L. Jesus, Quantum systems with position-dependent mass and spin-orbit interaction via Rashba and Dresselhaus terms, J. Math. Phys. 56, 012107 (2015).
- [72] A. G. M. Schmidt, Solution for Pauli equation in a toroidal surface with uniform magnetic field, Phys. E, 110, 88 (2019).
- [73] A. G. M. Schmidt, A. L. Jesus, Mapping between charge-monopole and position-dependent mass systems, J. Math. Phys. 59, 102101 (2018).

- [74] A. L. Jesus, A. G. M. Schmidt, Mapping between charge-dyon system and position dependent mass background, Commun. Theor. Phys. (2019)
- [75] J. Casanova, C. Sabín, J. León, I. L. Egusquiza, R. Gerritsma, C. F. Roos, J. J. García-Ripoll, E. Solano, Quantum Simulation of the Majorana Equation and Unphysical Operations, Phys. Rev. X, 1, 021018 (2011).
- [76] O.Boada, A. Celi, J. I. Latorre, M. Lewenstein, Dirac Equation For Cold Atoms In Artificial Curved Spacetimes, New Jour. Phys., 13 035002 (2011).
- [77] H. Kim, G. Zhu, J. V. Porto, M. Hafezi, Optical lattice with torus topology, Phys. Rev. Lett. 121, 133002 (2018).
- [78] O. Boada, A. Celi, J. R.-Laguna, J. I. Latorre, M. Lewenstein, Quantum simulation of non-trivial topology, New J. Phys. 17, 045007 (2015).
- [79] Y. Kazama, C. N. Yang, A. S. Goldhaber, cattering of a Dirac particle with charge Z_e by a fixed magnetic monopole, Phys. Rev. D 15, 2287 (1977).
- [80] S. Tanda, T. Tsuneta, Y. Okajima, K. Inagaki, K. Yamaya, N. Hatakenata, A Möbius strip of single crystals, Nature 417, 397 (2002).
- [81] K. Kowalski, K. Podlaski, J. Rembieliński, Quantum mechanics of a free particle on a plane with an extracted point, Phys. Rev. A 66, 032118 (2002).
- [82] M. Lozada-Cassou, S.-H. Dong, J. Yu, Quantum features of semiconductor quantum dots, Phys. Lett. A 331, 45 (2004).

- [83] S.-Q. Shen, Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters, Springer-Verlag (2012).
- [84] Y. A. Cho, J. R. Arthur, Molecular beam epitaxy, Prog. Solid State Chem. 10, 157 (1975).
- [85] M. A. Herman, H. Sitter, Molecular Beam Epitaxy Fundamentals and Current Status, Springer-Verlag (1996).
- [86] A. L. Jesus, A. G. M. Schmidt. Mapping between conical space and nonrelativistic position-dependent effective mass systems. Phys. Scripta. 94, 085006 (2019).
- [87] R. Schmitz, Seminar on Theoretical Particle Physics (Univ. of Bonn, 2006).