

CBPF

**Centro Brasileiro de
Pesquisas Físicas**

Tese de Doutorado

**TEORIAS DE CAMPO A BAIXAS ENERGIAS E
PROPRIEDADES FÍSICAS DO GRAFENO**

Ricardo Spagnuolo Martins

Rio de Janeiro

2016

TEORIAS DE CAMPO A BAIXAS ENERGIAS E PROPRIEDADES FÍSICAS DO GRAFENO

Ricardo Spagnuolo Martins

Tese apresentada ao Centro Brasileiro de
Pesquisas Físicas para a obtenção do título
de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. José Abdalla
Helayël-Neto

Rio de Janeiro

2016

Agradecimentos

Agradeço ao estimado professor, orientador, conselheiro e grande amigo José A. Helayël e também à professora e grande amiga Elena Konstantinova que sempre me inspiraram a cada dia ser uma pessoa melhor do que fui no dia anterior e não me abandonaram nem nos meus piores momentos.

Agradeço à CAPES e ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Resumo

Neste trabalho, investigamos efeitos de campos quânticos em propriedades físicas do grafeno por meio de simulações computacionais. Discutimos primeiramente aspectos teóricos da física do grafeno, em particular a inomogeneidade de Kekulé, então descrevemos a técnica utilizada para aproximar esta interação entre campos quânticos a um potencial de interação de baixas energias. Por fim, detalhamos o método computacional utilizado e discutimos os resultados deste procedimento.

Abstract

In this work we investigate the effects of quantum fields in the physical properties of graphene using computer simulations. Initially we discuss the theoretical aspects of graphene, in particular the Kekulé inhomogeneity, then we describe the technique we used to approximate this quantum field interaction to low energy interaction potentials. Finally, we describe the computational methods used and discuss the results of the aforementioned procedure.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares	6
2.1	Descrição Eletrônica do Grafeno Planar	7
2.2	Inomogeneidades, Textura de Kekulé e Campos de Gauge Quirais	12
2.3	Considerações do capítulo	19
3	Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman	21
3.1	Interação entre férmions via bóson escalar	23
3.1.1	Vértice escalar	23
3.1.2	Vértice pseudo-escalar	25
3.1.3	Interação entre vértices escalares	26
3.1.4	Interação entre um vértice escalar e um pseudoescalar	29
3.1.5	Interação entre vértices pseudoescalares	31
3.2	Interações entre férmions via bóson vetorial	32
3.2.1	Vértice vetorial	32
3.2.2	Vértice pseudo-vetorial	33
3.2.3	Interação entre vértices vetoriais	34
3.2.4	Interação entre um vértice vetorial e um pseudo-vetorial	38
3.2.5	Interação entre dois vértices pseudo-vetoriais	40
3.3	Considerações do capítulo	42
4	Modelagem computacional do grafeno planar e cálculo de propriedades físicas de interações não-relativísticas	44
4.1	Potenciais de interação escalares e propriedades magnéticas/termodinâmicas de materiais tipo grafeno	45

Conteúdo

4.1.1	Métodos computacionais	45
4.1.2	Resultados	48
4.1.3	Gráficos	50
4.1.4	Conclusões	56
4.2	Propriedades física de materiais tipo grafeno com correções de Kekulé e de polarização do vácuo	57
4.2.1	Métodos computacionais	59
4.2.2	Resultados e discussões	61
4.2.3	Discussão e considerações	73
5	Considerações finais e perspectivas futuras	79
A	Derivadas	84
B	Integrais	85

Lista de Figuras

2.1	(a) Rede hexagonal, sub-redes A e B mostradas em preto e cinza respectivamente. (b) Rede recíproca e alguns pontos da zona de Brillouin [29].	7
2.2	Zona de Brillouin do grafeno [12].	8
2.3	O espectro E do grafeno próximo a um ponto de Dirac como função dos momenta p_x e p_y . O espectro positivo corresponde à banda de condução e o negativo à banda de valência.	12
2.4	Padrão de dimerização para a estrutura do grafeno com a distorção de Kekulé [52].	13
2.5	Distorção na posição dos átomos vizinhos. Os pontos brancos representam as posições originais e os pontos hachurados representam as posições após as distorções. O comprimento da ligação pré-Kekulé é a e pós-Kekulé é a'	14
2.6	Representação do vetor $\vec{G}$ que conecta os dois pontos de Dirac $\vec{K}_{\pm}$ com gap de massa.	17
3.1	Espalhamento $1 + 2 \rightarrow 1' + 2'$	23
4.1	Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.	50
4.2	Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.	50
4.3	Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.	51
4.4	Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.	52

Lista de Figuras

4.5	Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.	52
4.6	Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.	53
4.7	Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.	54
4.8	Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.	54
4.9	Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.	55
4.10	Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.	62
4.11	Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com termo de dipolo incluso.	62
4.12	Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com primeiro termo de Kekulé incluso.	63
4.13	Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.	64
4.14	Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.	65
4.15	Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.	66
4.16	Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com termo de dipolo incluso.	66
4.17	Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com primeiro termo de Kekulé incluso.	67
4.18	Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.	68
4.19	Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.	69

Lista de Figuras

4.20 Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.	70
4.21 Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o termo de dipolo incluso.	70
4.22 Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o primeiro termo de Kekulé incluso.	71
4.23 Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.	72
4.24 Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.	72

1. Introdução

Computadores tornaram-se ubíquos no contexto social atual. Realizam das tarefas mais mundanas até as mais complexas, e encontram-se presentes também na física. A física computacional apresenta-se como uma alternativa para alcançar soluções de problemas altamente complexos ou mesmo aqueles que não possuem solução analítica. Um importante aspecto da física computacional é o de modelagem de sistemas de muitas variáveis altamente correlacionadas. As técnicas mais utilizadas para esta classe de problemas são as técnicas de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo permite analisar sistemas de muitos corpos a temperatura, volume e número de partículas pré-definidos. Também permite analisar modelos de spin na rede, importantes para sistemas de matéria condensada e mecânica estatística. Entretanto, este método não é adequado para o estudo de variáveis dinâmicas, pois é um método estocástico que não observa características dinâmicas do sistema. Isto significa que o método Monte Carlo utiliza números aleatórios para descobrir configurações de equilíbrio através de um processo iterativo. Cada configuração gerada pelo método é baseada na configuração anterior e na história de todas as configurações geradas. Isto é um exemplo de corrente de Markov. Cada configuração aleatória gerada é adotada caso satisfaça um critério de cutoff previamente estabelecido com uma probabilidade de distribuição de Boltzmann $\propto e^{-E/kT}$. Portanto, esta dinâmica dos métodos de Monte Carlo não é adequada para tratar de problemas que possuem uma dinâmica específica, ou seja, cuja posição em um tempo futuro dependa deterministicamente de variáveis dinâmicas em um tempo passado. Existem métodos de Monte Carlo dinâmicos, como *simulated annealing* (simulação de arrefecimento). Como literatura atual sobre métodos computacionais em física, sugerimos as referências a seguir [1–11].

O grafeno é um material composto de átomos de carbono arranjados em uma es-

1. Introdução

estrutura cristalina bidimensional hexagonal. É um material importante devido a suas características físicas. Os estudos teóricos sobre o grafeno iniciaram-se em 1947, com Wallace [12]. Uma das características eletrônicas mais importantes é que o grafeno pode ser descrito pela equação de Dirac para férmions sem massa, como apontado inicialmente por Semenoff em 1984 [13]. Isto significa que, apesar de ser um sistema não relativístico (a velocidade dos férmions no grafeno é da ordem de $c/300$), a descrição pela equação de Dirac garante uma simetria de conjugação de carga no material. Além disso, é possível utilizar os métodos bem sedimentados da Teoria de Campos Quânticos para estudar propriedades física e topológicas do grafeno. A física do grafeno é sensível aos diversos tipos de estímulos à sua estrutura, como a aplicação de tensão mecânica, defeitos topológicos como a curvatura gerada por uma assimetria rotacional, disclinações (defeitos estruturais que também eliminam a simetria rotacional), variações naturais no comprimento das ligações, ondulações sobre o substrato, etc. Cada uma destas alterações provoca uma mudança na equação de Dirac que descreve o grafeno, produzindo acoplamento com campos de gauge, com campos escalares, geração de campo magnético e até campo elétrico. Para uma descrição completa atual sobre estes fenômenos, sugerimos as seguintes referências recentes [14–29]. Descrevemos alguns aspectos fundamentais da física do grafeno no capítulo 2.

Como tema chave deste trabalho, procuramos responder ao questionamento: como algumas propriedades físicas mensuráveis do grafeno variam em resposta a estas mudanças na descrição eletrônica? Em outras palavras, que tipo de mudanças nas propriedades físicas estão associadas a estes efeitos de campos quânticos?

Procuramos abordar esta questão através da modelagem computacional utilizando o método de Monte Carlo. Este método já é consagrado na literatura para o cálculo de propriedades físicas em equilíbrio em sistemas de matéria condensada (veja [30, 31] para mais detalhes).

A maneira que encontramos para traduzir as interações em TQC para potenciais de interação não-relativísticos passíveis de serem utilizados neste método computacional é descrito no capítulo 3. Feinberg e Sucher [32–35] desenvolveram um método para aproximar interações de TQC a partir de diagramas de Feynman como potenciais de interação não-relativísticos que podem ser utilizados, que foi aprimorado por

1. Introdução

Dobrescu e Mocioiu [36] e Moody e Wilczek [37]. Com isto, podemos modelar o grafeno computacionalmente e calcular suas propriedades físicas utilizando potenciais de interação referentes aos acoplamentos entre os campos quânticos relativísticos.

Esta linha de trabalho no âmbito da obtenção dos potenciais é também objeto de pesquisa de outros membros do nosso grupo. Embora tenhamos escolhido uma abordagem para utilização dos potenciais na matéria condensada, em específico no contexto do grafeno, há outras aplicações para este método, como por exemplo a investigação sobre a possibilidade de novas forças de longo alcance mediada por áxions, partículas superssimétricas ou parafótons, com possível reflexo em sistemas de matéria escura. Outros trabalhos do nosso grupo que caminham nesta outra linha podem ser encontrados nas referências [38, 39].

Um desafio deste método consiste em primeiramente obter os tais potenciais de interação não-relativísticos. Alguns sistemas, principalmente de ordens elevadas na constante de acoplamento, apresentam diversos potenciais possíveis, a depender da escolha do gauge, por exemplo. O fato destes potenciais serem aproximações dos casos relativísticos introduz uma etapa de triagem e reflexão na escolha de um potencial fidedigno do sistema original.

Outro desafio do método reside na escolha dos parâmetros de ajuste do modelo. Como mostraremos na seção 4.2, há uma multiplicidade nos possíveis valores das constantes de ajuste. Devemos escolher o hamiltoniano do sistema de forma a garantir que nossos resultados possam ter um respaldo teórico ou experimental nesta fase de implementação do algoritmo. Provado o sucesso do método, podemos extrapolar para casos ainda não explorados com segurança.

A estrutura deste trabalho é a que segue:

No capítulo 2, estabelecemos o arcabouço teórico da física do grafeno. A seção 2.1 traz a descrição teórica do grafeno planar e a sua relação com a equação de Dirac. Nela seguimos o caminho traçado por Wallace, com uma descrição moderna aprimorada por diversos autores referenciados no texto. Na seção 2.2, desenvolvemos o formalismo de uma inomogeneidade na estrutura cristalina do grafeno, chamada textura de Kekulé. Esta textura introduz a mistura entre pseudospins e também o acoplamento com um campo escalar, relacionado com o parâmetro de ordem do sistema. Posteriormente,

1. Introdução

utilizamos este acoplamento para obter o potencial de interação de Kekulé que foi modelado computacionalmente. Portanto, este capítulo insere-se na tese aprofundando o seguinte contexto:

Como sistemas bidimensionais com 2 pseudogaus de liberdade podem ser descritos através da equação de Dirac para férmions sem massa e como uma distorção na planaridade desta estrutura promove a mistura entre vales e dá surgimento ao acoplamento com um campo escalar.

No capítulo 3, detalhamos o método para obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman. Na seção 3.1 trazemos o caso particular da interação entre férmions mediada por um bóson escalar massivo, onde obtivemos o potencial de monopolo-monopolo, monopolo-dipolo e dipolo-dipolo. Identificamos estes potenciais como sendo reflexos da textura de Kekulé no nosso modelo computacional. Na seção 3.1.4 detalhamos o método de obtenção de potenciais de interação entre férmions mediada por um fóton, procedimento tradicional da eletrodinâmica quântica. O procedimento mostrado obtém em primeira ordem o potencial de Coulomb conhecido. Portanto, este capítulo insere-se na tese aprofundando o seguinte contexto:

Como uma interação modelada em uma Teoria Quântica de Campos pode produzir um potencial de interação de baixas energias que pode ser utilizado em um contexto da Mecânica Quântica de Schrödinger e quais são os potenciais gerados devido ao acoplamento de férmions com campos escalares e férmions com campos vetoriais.

No capítulo 4 apresentamos a consolidação dos capítulos 2 e 3 no modelo computacional para o cálculo das seguintes propriedades físicas do grafeno: magnetização, susceptibilidade magnética e calor específico. A seção 4.1 traz os resultados do trabalho com um primeiro estágio de desenvolvimento do algoritmo. Neste caso, o modelo reproduziu com sucesso o caráter diamagnético do grafeno e fornece características do calor específico do material a baixas temperaturas. Estes resultados foram publicados conforme a referência [40]. Na seção 4.2 trazemos os resultados dos trabalhos em um segundo estágio de desenvolvimento do algoritmo, incluindo o potencial devido a polarização do vácuo. O modelo reproduz com sucesso o caráter diamagnético

1. Introdução

do grafeno novamente e replica o resultado teórico de [41] para o calor específico a baixas temperaturas. Estes resultados foram submetidos para publicação e o preprint encontra-se conforme a referência [42]. Portanto, este capítulo compila as contribuições originais que culminam com o seguinte resultado:

O método proposto de obtenção de potenciais a partir de diagramas de Feynman é viável para modelarmos sistemas com intuito de prospecção de propriedades físicas macroscópicas e suas alterações devidos a tipos específicos de interações oriundas de um domínio microscópico.

Por fim, no capítulo 5 tecemos nossas considerações gerais sobre o trabalho, procurando enumerar as vulnerabilidades que encontramos no modelo e perspectivas futuras de trabalho. Foram feitas discussões parciais em cada capítulo.

Os apêndices A e B trazem, em detalhes, cálculos que foram omitidos do capítulo 3.

2. Grafeno: relação com a TQC, inomegeneidades e campos escalares

O grafeno é uma estrutura bidimensional constituída por átomos de carbono posicionados nos vértices de uma rede hexagonal. Cada carbono possui hibridização sp^2 e pode realizar ligações com outros 4 átomos. Cada carbono no grafeno se liga fortemente com outros 3 átomos vizinhos por ligações σ . O orbital $2p_z$ do quarto elétron cria uma ligação π com um átomo vizinho. As ligações σ dão origem à estrutura de ligações covalentes com a geometria da rede hexagonal. A intensidade destas ligações é responsável pela flexibilidade e tenacidade da rede. As ligações π são responsáveis pela estrutura eletrônica incomum do grafeno. Cada ligação π é semi-preenchida, permitindo que os elétrons do orbital p tunelem para sítios vizinhos.

A estrutura de banda do grafeno é aproximadamente a de uma banda de valência completa e uma de condução vazia com formato cônico, convergindo em um ponto chamado ponto de Dirac. Há dois pares não equivalentes destes cones, cada um referente a uma sub-rede cristalina. Este modelo descreve adequadamente fenômenos de baixa energia. A descrição teórica de sua estrutura é conhecida há décadas [12, 43, 44] embora tenha sido obtido experimentalmente apenas em 2004 [45–47]

Um aspecto importante do grafeno é que defeitos topológicos ou de sua própria estrutura ou do substrato podem ocasionar o aparecimento de um campo de gauge efetivo [17, 26, 48, 49]. Este campo de gauge efetivo pode ser induzido caso existam ondulações ou pregas periódicas na estrutura [50], curvatura ou tensão [51] ou inomegeneidade na transição eletrônica entre sítios vizinhos [52–54]. Com respeito ao último caso, é possível introduzir uma teoria de campo de gauge quiral abeliano na presença de vórtice, representado por um campo escalar complexo. Estas inomegeneidades são chamadas de distorções, ou textura, de Kekulé.

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

Neste trabalho focamos apenas em alguns aspectos da física do grafeno que estabelecem conexão com a QED e o surgimento de campos de gauge. Já é fato bem estabelecido teorica e experimentalmente que o grafeno é coberto por ondulações que podem ser intrínsecas ou induzidas pelo substrato [26]. Diferentes defeitos topológicos são conhecidos por produzir um campo de gauge não abeliano e serão discutidos em brevidade neste trabalho.

2.1. Descrição Eletrônica do Grafeno Planar

O grafeno possui uma estrutura cristalina hexagonal, como mostrado na figura 2.1. Os vetores de rede são

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

onde a distância entre os primeiros vizinhos é $a \approx 1,42 \text{ \AA}$.

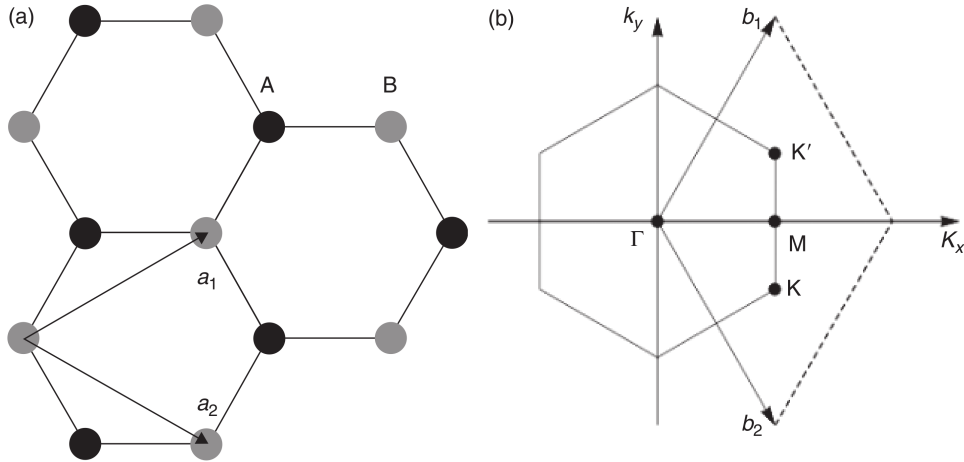


Figura 2.1.: (a) Rede hexagonal, sub-redes A e B mostradas em preto e cinza respectivamente. (b) Rede recíproca e alguns pontos da zona de Brillouin [29].

A estrutura hexagonal contém dois átomos por célula unitária, pertencentes às sub-redes A e B. Cada átomo de uma sub-rede possui todos seus primeiros vizinhos da outra sub-rede.

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

Os vetores que localizam os primeiros vizinhos de um sítio da rede hexagonal são

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

que podem ser escritos em termos dos vetores da rede de Bravais

$$\vec{\delta}_1 = \frac{1}{3}(2\vec{a}_1 - \vec{a}_2), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{1}{3}(-\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2), \quad \vec{\delta}_3 = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2). \quad (2.1.1)$$

A rede recíproca também é triangular e satisfaz a condição $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Estes vetores são

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

Os pontos da rede recíproca mostrados na figura 2.1(b) possuem vetores de onda

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{M} = \frac{2\pi}{3a}(1, 0). \quad (2.1.2)$$

Aqui vemos a rede recíproca em outra perspectiva, com os pontos $\vec{K}$ e $\vec{K}'$ correspondendo às sub-redes A e B.

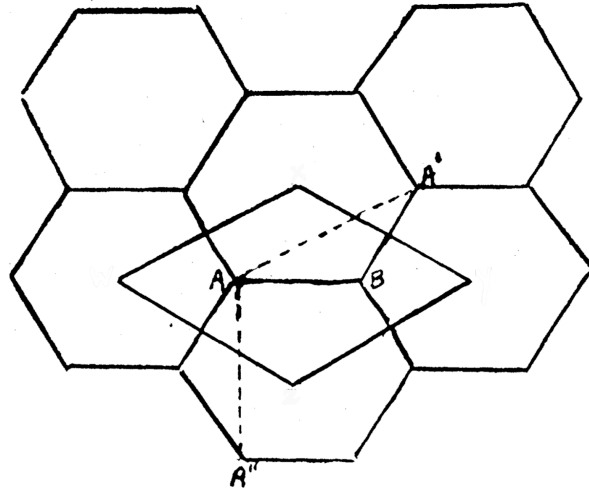


Figura 2.2.: Zona de Brillouin do grafeno [12].

A descrição mais simples do grafeno como uma estrutura perfeitamente planar composta de átomos de carbono em uma estrutura cristalina hexagonal é dada através do modelo de tight binding, que foi primeiramente obtido por Wallace [12] e posteriormente desenvolvido por McClure [43] e Slonczewski e Weiss [44].

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

Seguindo o formalismo definido em [12], o hamiltoniano tight-binding que para elétrons no grafeno, considerando que estes elétrons podem saltar para os primeiros e para os segundos vizinhos, é

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{c.c.}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{c.c.}) \quad (2.1.3)$$

onde o operador $a_{\sigma,i}^\dagger$ ($a_{\sigma,i}$) cria (aniquila) um elétron no sítio i da sub-rede A com spin σ , $b_{\sigma,i}^\dagger$ ($b_{\sigma,i}$) cria (aniquila) um elétron no sítio i da sub-rede B com spin σ e t é a energia de transição de tunelamento entre primeiros vizinhos ($\approx 2.8\text{eV}$) e t' é a energia de transição entre segundos vizinhos¹.

Definimos a transformada de Fourier dos operadores de campo no limite contínuo

$$a_n = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} a(\vec{k}), \quad b_n = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} b(\vec{k}) \quad (2.1.4)$$

onde $\vec{R}_n$ representa o vetor posição do sítio.

Vamos considerar o caso da transição apenas entre primeiros vizinhos. Neste caso, é conveniente utilizarmos os vetores δ (2.1.1) que localizam a posição dos primeiros vizinhos de um determinado sítio. O hamiltoniano então pode ser escrito como

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\Phi(\vec{k}) a^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) + \Phi^*(\vec{k}) b^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}) \right) \quad (2.1.5)$$

onde $\Phi(\vec{k}) = -t \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right] = -t \left[2e^{\frac{ik_x a}{2}} \cos\left(\frac{k_y a \sqrt{3}}{2}\right) + e^{-ik_x a} \right]$. Na forma matricial, o hamiltoniano fica

$$H = \int d^2k \begin{pmatrix} a^\dagger(\vec{k}) & b^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Phi(\vec{k}) \\ \Phi^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(\vec{k}) \\ b(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (2.1.6)$$

Os autovalores de energia para este hamiltoniano tem a forma ([12])

$$E_{\pm}(\vec{k}) = |\Phi(\vec{k})|^{1/2} = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (2.1.7)$$

¹O valor de t' a partir de simulações *ab initio* encontra-se entre $0,02t \lesssim t' \lesssim 0,2t$ [48]

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

onde

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right), \quad (2.1.8)$$

e o sinal positivo aplica-se para bandas π superiores e o sinal negativo para inferiores.

A energia é nula para dois valores de momenta, chamados de pontos de Fermi ou pontos de Dirac, definidos anteriormente em (2.1.2).

Isto significa que nestes pontos há cruzamento entre as bandas. Mesmo na ausência de um potencial externo, a banda de valência se encontra completamente preenchida em $T = 0$ e a banda de condução encontra-se completamente cheia ([29]) e não há gap entre as bandas. Por isto, o comportamento do grafeno é o de um semicondutor sem gap. No limite de baixas energias ($a \rightarrow 0$), apenas estados próximos aos pontos de Dirac terão energia suficiente para participar da dinâmica do sistema.

Portanto, é conveniente representar os campos a_n e b_n como a superposição dos vetores nos pontos $\vec{K}$ e $\vec{K}'$

$$a_n = e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_n} a_{1,n} + e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{R}_n} a_{2,n} \quad (2.1.9)$$

$$b_n = e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_n} b_{1,n} + e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{R}_n} b_{2,n}, \quad (2.1.10)$$

onde o índice $i=1$ ($i=2$) refere-se ao ponto K (K').

Considerando novamente a aproximação para primeiros vizinhos e aplicando a condição $\sum_{\vec{\delta}} e^{\pm i\vec{K} \cdot \vec{\delta}} = \sum_{\vec{\delta}} e^{\pm i\vec{K}' \cdot \vec{\delta}} = 0$, expandimos o hamiltoniano (2.1.5) para valores de momenta em torno dos pontos de Dirac $\vec{k} = \vec{K} + \vec{p}$ e $\vec{k} = \vec{K}' + \vec{p}$

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\phi_+^*(\vec{K} + \vec{p}) a_{\sigma,1}^\dagger(\vec{K} + \vec{p}) b_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) + \phi_-^*(\vec{K}' + \vec{p}) a_{\sigma,2}^\dagger(\vec{K}' + \vec{p}) b_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) + \text{c.c.} \right] \quad (2.1.11)$$

onde mantivemos apenas termos de primeira ordem e assumimos que $|\vec{p}|$ é pequeno e $\phi_{\pm} = \pm v_F(p_x \pm ip_y)$ e a velocidade de Fermi $v_F = 3ta/2$.

Podemos escrever este hamiltoniano (2.1.11) na forma matricial, escolhendo uma base de espinores quadridimensional adequada

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Psi_{\sigma}^\dagger(\vec{p}) \mathcal{H}(\vec{p}) \Psi_{\sigma}(\vec{p}), \quad (2.1.12)$$

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

$$\mathcal{H}(\vec{p}) = v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \\ 0 & -(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \end{pmatrix}; \quad \Psi_\sigma(\vec{p}) = \begin{pmatrix} a_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) \\ b_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) \\ a_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) \\ b_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) \end{pmatrix} \quad (2.1.13)$$

onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli.

Podemos também escrever o hamiltoniano no espaço das configurações, fazendo a transformada de Fourier inversa. Neste caso, temos

$$H = \int \frac{d^2r}{(2\pi)^2} \psi^\dagger(\vec{r}) \mathcal{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \quad (2.1.14)$$

$$\mathcal{H}(\vec{p}) = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \\ 0 & -(\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) \end{pmatrix} \quad (2.1.15)$$

sendo $\Psi(\vec{r})$ a função de onda eletrônica que é solução da equação de Dirac em 2 dimensões.

Podemos identificar (2.1.15) como uma equação tipo Dirac para férmions de massa nula em duas dimensões

$$-iv_F \hbar \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.1.16)$$

com

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

A equação (2.1.16) nos mostra que devido à presença dos pontos de Dirac distintos, o comportamento do grafeno em baixas energias pode ser descrito pelo operador de Dirac relativístico $\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ com relação de dispersão linear exibida na figura 2.3.

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

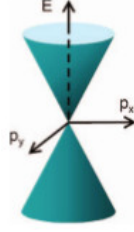


Figura 2.3.: O espectro E do grafeno próximo a um ponto de Dirac como função dos momenta p_x e p_y . O espectro positivo corresponde à banda de condução e o negativo à banda de valência.

Podemos obter a relação de dispersão para a estrutura de bandas expandindo para valores de momento pequenos em torno dos pontos $\vec{K}$ (ou $\vec{K}'$), fazendo $\vec{k} = \vec{K} + \vec{p}$ com $|\vec{p}| \ll |\vec{K}|$, obtendo

$$E_{\pm}(\vec{p}) \approx \pm v_F |\vec{p}| + O[(p/K)^2], \quad (2.1.17)$$

onde $\vec{p}$ é o momento medido relativamente aos pontos $\vec{K}$ chamados pontos de Dirac, e $v_F = \frac{3ta}{2}$ é a velocidade de Fermi dos elétrons ($\approx 10^6 \text{m/s}$).

O fato dos férmions de Dirac não possuírem massa no grafeno é responsável pela alta mobilidade dos portadores de carga. A presença dos pontos de Dirac é responsável pelo seu comportamento semi-metálico, ou seja, se comporta como um metal devido à ausência de gap entre as bandas de condução e valência, mas o número de portadores de carga é pequeno devido à pequena densidade de estados no nível de Dirac.

2.2. Inomogeneidades, Textura de Kekulé e Campos de Gauge

Quirais

A seção anterior lida com a estrutura teórica perfeitamente planar do grafeno. Entretanto, o caráter da estrutura cíclica das ligações na rede hexagonal do grafeno, alternando ligações simples e duplas entre átomos vizinhos, introduz uma assimetria na rede cristalina.

Esta é chamada de distorção de Kekulé, onde permitimos uma variação da posição dos átomos de carbono da rede cristalina em direções arbitrárias, não apenas ao longo das ligações entre sítios vizinhos.

Estas distorções da rede alteram o comprimento das ligações e, portanto, também

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

alteram a probabilidade dos elétrons transitarem entre os sítios. Efetivamente, isto acarreta uma mudança na simetria da estrutura cristalina, como mostra a figura a seguir

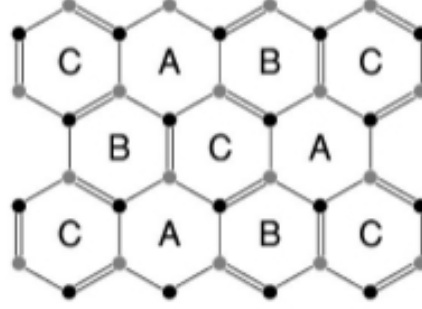


Figura 2.4.: Padrão de dimerização para a estrutura do grafeno com a distorção de Kekulé [52].

Na textura de Kekulé, o tamanho da célula unitária é triplicado devido à dimerização da estrutura, tornando os hexágonos A, B e C distintos. Com isto, temos então um acoplamento entre os pontos de Dirac.

Representamos esta condição através do hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} [t + \delta t_i(\vec{r})] (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (2.2.1)$$

onde, assim como na equação (2.1.3), o operador $a_i^\dagger$ cria um elétron no sítio i , a_j aniquila um elétron no sítio j e t é a intensidade da transição de tunelamento e introduzimos o termo δt_i que representa pequenas variações na intensidade de transição entre sítios.

A textura de Kekulé, representada na figura 2.4, permite a mistura quiral entre as subredes 1 e 2.

Na tentativa de obter uma expressão para δt_i , vamos considerar que as distorções na rede possam ser descritas como pequenos deslocamentos dos átomos de suas posições de equilíbrio. Definimos estes deslocamentos em termos das posições dos sítios original $\vec{r}$

$$A(\vec{r}) = \mathcal{A}e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad ; \quad B(\vec{r}) = \mathcal{B}e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \quad (2.2.2)$$

onde $A(\vec{r})$ e $B(\vec{r})$ estão em sub-redes distintas.

Podemos calcular a diferença no comprimento das ligações pré e pós Kekulé se con-

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

siderarmos os deslocamentos mostrados na figura 2.5

$$\delta a_i = |a' - a| = |\delta_i - A(\vec{r}) + B(\vec{r} + \vec{\delta}_i)| - a. \quad (2.2.3)$$

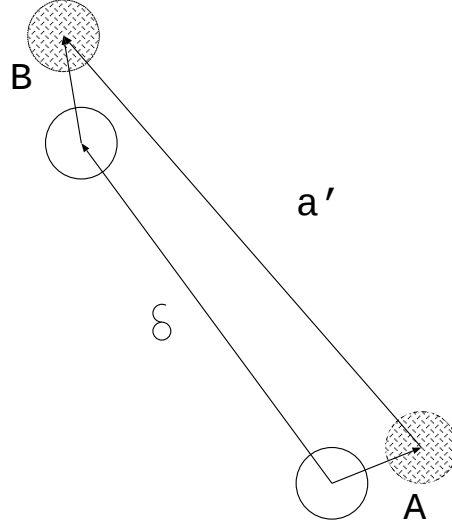


Figura 2.5.: Distorção na posição dos átomos vizinhos. Os pontos brancos representam as posições originais e os pontos hachurados representam as posições após as distorções. O comprimento da ligação pré-Kekulé é a e pós-Kekulé é a' .

Considerando δ_i , A e B no plano complexo, podemos reescrever a expressão (2.2.3) como

$$\frac{\delta a_i}{a} = \sqrt{\frac{1}{a^2}(\delta_i - A + B)^*(\delta_i - A + B)} - 1. \quad (2.2.4)$$

Considerando $A \ll a$, $B \ll a$ e $\bar{\delta}_i \delta_i = a^2$, podemos fazer uma aproximação em primeira ordem e obter

$$\frac{\delta a_i}{a} \approx -\frac{1}{2} \frac{\bar{\delta}_i}{a} \left(\frac{A(\vec{r})}{a} + \frac{B(\vec{r} + \vec{\delta}_i)}{a} \right) + \text{c.c.} \quad (2.2.5)$$

Cada átomo de uma sub-rede relaciona-se com um primeiro vizinho da outra sub-rede por uma rotação de $2\pi/3$. No plano complexo, podemos contemplar esta rotação definindo a raiz cúbica de 1 através da relação

$$z_j = e^{i(2\pi/3)(j-i)}. \quad (2.2.6)$$

2. Grafeno: relação com a TQC, inomogeneidades e campos escalares

Desta forma, ao tomarmos como referência um ponto de uma sub-rede, podemos definir o deslocamento de um átomo da sub-rede vizinha como

$$B(\vec{r} + \vec{\delta}_i) = \mathcal{B}e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\bar{z}_i \quad (2.2.7)$$

e o vetor que localiza a posição original dos primeiros vizinhos

$$\vec{\delta}_i = -iaz_i. \quad (2.2.8)$$

Usando (2.2.7) e (2.2.8), podemos reescrever a equação (2.2.5), temos

$$\frac{\delta a_i}{a} = i\bar{\epsilon}z_i e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} - i\epsilon\bar{z}_i e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \quad (2.2.9)$$

onde definimos

$$\epsilon = \frac{\mathcal{A} + \bar{\mathcal{B}}}{2a} \quad (2.2.10)$$

que representa o vetor deslocamento efetivo que altera o comprimento das ligações.

A variação da energia elástica obtida ao aumentar ou diminuir o comprimento das ligações é

$$\delta E = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{2} K [a_i - a]^2, \quad (2.2.11)$$

onde N é o número de sítios e K é um parâmetro que representa a constante elástica.

Usando a expressão (2.2.9), temos

$$\delta E = 3Ka^2|\epsilon|^2. \quad (2.2.12)$$

Vemos que a energia é independente da fase, ou seja, é independente da direção da distorção das ligações entre os átomos. Isto implica que este sistema possui uma simetria de rotação $U(1)$.

Utilizando (2.2.9) e (2.2.12), podemos encontrar a expressão que relaciona a mudança de probabilidade de transição entre sítios vizinhos se fizermos uma expansão

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

na expressão $t_j(\vec{r}) = te^{-\alpha \frac{\delta a_j}{a}}$, obtendo

$$\frac{\delta t_i(\vec{r})}{t} = \lambda_i e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} + \bar{\lambda}_i e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} + \alpha^2 |\epsilon|^2, \quad (2.2.13)$$

onde definimos

$$\lambda_i = \left[-i\alpha\bar{\epsilon} - \frac{\alpha^2}{2}\epsilon^2 \right] z_i \quad (2.2.14)$$

Utilizando (2.2.13) no hamiltoniano (2.2.1) e repetindo o procedimento realizado na seção 2.1 até a linearização do espectro, encontramos a seguinte expressão

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\phi_+^*(\vec{K} + \vec{p}) a_{\sigma,1}^\dagger(\vec{K} + \vec{p}) b_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) + \phi_-(\vec{K}' + \vec{p}) a_{\sigma,2}^\dagger(\vec{K}' + \vec{p}) b_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) + \text{c.c.} \right. \\ \left. + \Delta(\vec{r}) a_{\sigma,1}^\dagger(\vec{K} + \vec{p}) b_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) + \Delta(\vec{r}) b_{\sigma,1}^\dagger(\vec{K} + \vec{p}) a_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) + \text{c.c.} \right] \quad (2.2.15)$$

onde $\Delta(\vec{r})$ é o parâmetro de ordem

$$\frac{\Delta(\vec{r})}{t} = -3i\alpha\bar{\epsilon} + \frac{3}{2}\alpha^2\epsilon^2. \quad (2.2.16)$$

e $\phi_\pm$ é novamente $\phi_\pm = \pm v_F(p_x \pm ip_y)$.

Escrevendo na forma matricial, temos

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Psi_\sigma^\dagger(\vec{p}) \mathcal{H}'(\vec{p}) \Psi_\sigma(\vec{p}) \quad (2.2.17)$$

$$\mathcal{H}' = v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & \beta \Delta(\vec{r}) \\ \beta \Delta^*(\vec{r}) & -(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \end{pmatrix} \quad ; \quad \Psi_\sigma(\vec{p}) = \begin{pmatrix} a_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) \\ b_{\sigma,1}(\vec{K} + \vec{p}) \\ a_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) \\ b_{\sigma,2}(\vec{K}' + \vec{p}) \end{pmatrix}, \quad (2.2.18)$$

onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e $\beta = \frac{1}{v_F} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Vale chamar a atenção que a forma de β depende da base escolhida para formar Ψ . Na base que escolhemos, β é identicamente

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

igual à σ_x . Entretanto, em uma base diferente ela assume uma representação diferente.

Portanto, podemos observar que no espaço das configurações o hamiltoniano obtido passa a ser agora equivalente ao hamiltoniano de Dirac para partículas massivas

$$-i\hbar\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{r}) + \beta \otimes \tau_1 \Delta(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.2.19)$$

com

$$\vec{\alpha} = v_F \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

e

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

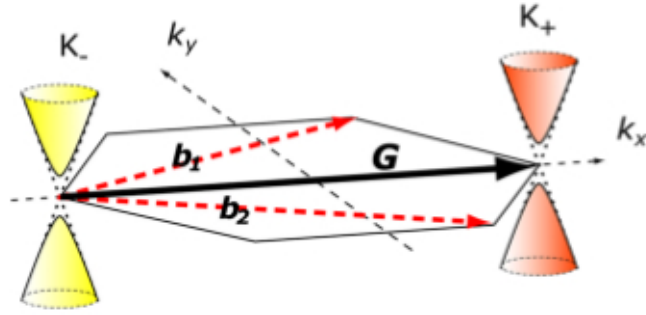


Figura 2.6.: Representação do vetor $\vec{G}$ que conecta os dois pontos de Dirac $\vec{K}_{\pm}$ com gap de massa.

O parâmetro de ordem $\Delta(\vec{r})$ pode ser complexo, mas o gap de massa é real. Ao considerarmos $\Delta(\vec{r}) = \Delta_0(r)e^{i(\alpha+n\theta)}$ como um parâmetro de ordem complexo com $\Delta_0(r) > 0$, $n \in \mathbb{Z}$, é possível mostrar que o espectro deste hamiltoniano passa a ser

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm \sqrt{|\vec{p}|^2 + |\Delta_0|^2} \quad (2.2.20)$$

Isto significa que, na presença da textura de Kekulé, o espectro de energia adquire um gap de massa nos pontos de Dirac e a fase de $\Delta(\vec{r})$ é responsável pelo surgimento de vórtices e fracionamento da carga dos férmions.

Jackiw em [54] identifica estes vórtices como tipo Nielsen-Olesen-Landau-Ginsburg-Abrikosov (NO-LGA), que são descritos por um campo escalar complexo e também por

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

um campo de gauge com simetria $U(1)$.

Para isto, vamos reescrever o hamiltoniano (2.2.17) em termos de novas matrizes de Dirac de forma a contemplar a textura de Kekulé

$$\vec{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3) = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.21)$$

Também podemos construir a matriz quiral γ_5

$$\gamma_5 = -i\alpha^1\alpha^2\alpha^3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma_5^2 = I \quad (2.2.22)$$

$$\vec{\gamma} = \beta\vec{\alpha}, \quad \gamma^0 = \beta \otimes \tau_1, \quad \gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (2.2.23)$$

Note que os α^i anticomutam entre si e com β ; γ_5 comuta com os α^i e anticomuta com β .

Desta maneira, podemos reescrever a densidade de hamiltoniano de Dirac como

$$\Psi^* K \Psi = \Psi^* (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + g\beta[\varphi^r - i\varphi^i\gamma_5])\Psi, \quad (2.2.24)$$

onde $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$, renomeamos $\Delta(\vec{r}) = g\varphi$, onde g é uma constante de acoplamento e φ é um campo escalar complexo com partes real e imaginária $\varphi = \varphi^r + i\varphi^i$. Escrevendo o campo na notação polar $\varphi = |\varphi|e^{i\chi}$, o termo de interação de (2.2.24) pode ser escrito como $g|\varphi|\Psi^*\beta e^{-i\chi\gamma_5}\Psi$. É possível mostrar que esta interação é invariante sob uma transformação de gauge quiral local

$$\varphi \rightarrow e^{2i\omega}\varphi \Rightarrow \chi \rightarrow \chi + 2\omega, \quad \Psi \rightarrow e^{i\omega\gamma_5}\Psi \quad (2.2.25)$$

Para que o termo cinético também seja invariante sob esta transformação, precisamos introduzir o acoplamento ao campo de gauge, cuja transformação é

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\omega. \quad (2.2.26)$$

Com isto, nossa densidade hamiltoniana quiral completa é escrita como

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

$$\Psi^* K_A \Psi = \bar{\Psi}^* \vec{\alpha} \cdot [\vec{p} - \gamma_5 \vec{A}] \Psi + g \bar{\Psi}^* \beta [\varphi^r - i \gamma_5 \varphi^i] \Psi \quad (2.2.27)$$

$$\bar{\Psi}_+ \vec{\gamma} \cdot (\vec{p} - \vec{A}) \Psi_+ + \bar{\Psi}_- \vec{\gamma} \cdot (\vec{p} + \vec{A}) \Psi_- + g \varphi \bar{\Psi}_+ \Psi_- + g \varphi^* \bar{\Psi}_- \Psi_+ \quad (2.2.28)$$

onde definimos o adjunto de Dirac $\bar{\Psi} \equiv \Psi^* \gamma^0$ e os componentes quirais $\Psi_{\pm} \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5) \Psi$ cuja transformação é relacionada com a transformação de gauge do campo $\vec{A}$

$$\Psi_{\pm} \rightarrow e^{\pm i\omega} \Psi_{\pm}, \quad \bar{\Psi}_{\pm} \rightarrow \bar{\Psi}_{\pm} e^{\mp i\omega}$$

2.3. Considerações do capítulo

Neste capítulo mostramos como o grafeno pode ser descrito por uma equação de Dirac para férmions sem massa quando modelamos o grafeno como um sistema perfeitamente plano e com estrutura cristalina sem defeitos. Isto traz grandes implicações para a estrutura eletrônica do grafeno. Devido às baixas velocidades dos portadores de carga, elétrons e buracos seriam descritos por equações de Schrödinger não acopladas [24] com massas efetivas distintas. Em contraste, pelo fato da estrutura eletrônica do grafeno ser descrita pela equação de Dirac, isto garante que as propriedades dos portadores de carga exibam propriedades similares à simetria de conjugação de carga de teorias de campo.

Por ser uma estrutura bidimensional imersa em um espaço tridimensional, sua estrutura cristalina sofreria de instabilidades devido a flutuações de longo comprimento de onda. Entretanto, o acoplamento não linear entre modos de torção e de tensão resulta em uma estrutura estável, mas com corrugações, ondulações e outras deformações estruturais contínuas. Estas corrugações modificam a sua estrutura eletrônica, introduzindo campos de gauge efetivos. O mixing de pseudospins (sub-redes) também é dado por campos de gauge efetivos, mas envolvendo anomalias estruturais do tipo disclinações, curvatura ou defeitos estruturais como deslocamentos, que produzem campos magnéticos. Neste capítulo não discutimos os diversos efeitos deste tipo. Para uma análise aprofundada sobre o assunto, sugerimos as referências [16, 20, 24–26, 29, 50, 51, 55–58].

2. Grafeno: relação com a TQC, inhomogeneidades e campos escalares

Tensões estruturais podem produzir acoplamentos com campos escalares. Neste capítulo, mostramos como um tipo específico de tensão na estrutura cristalina do grafeno, ocasionada pelas ligações entre os átomos, promove o surgimento de campos escalares acoplados aos férmions de Dirac. Para a textura de Kekulé, mostramos o acoplamento de campos escalares e campos de gauge quirais. O foco neste tipo de anomalia estrutural específica é justificado no capítulo 4, no qual modelamos este acoplamento e simulamos o comportamento de algumas propriedades termodinâmicas e magnéticas na presença deste campo escalar.

Além das referências já mencionadas no texto, sugerimos também como literatura introdutória sobre matéria condensada e estado sólido as seguintes referências [59–63].

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Historicamente, a maneira com que representamos a interação entre corpos na física passou por diversas interpretações distintas. Na mecânica clássica newtoniana, esta interação é descrita pela força que os corpos macroscópicos imprimem uns sobre os outros. Em uma reformulação da mecânica clássica pelo formalismo lagrangiano ou hamiltoniano, a interação é descrita por um potencial de interação, que representa a transferência de energia entre os corpos.

A interpretação da interação por meio de potenciais mostrou, ao longo do tempo, uma capacidade de previsão mais acurada e mais abrangente que sua predecessora. Com o advento da Mecânica Quântica de Schrödinger, a ideia de potenciais foi mantida para descrever a interação microscópica entre partículas não-relativísticas em um formalismo operacional hamiltoniano.

Em contraste, na Teoria Quântica de Campos utiliza-se a densidade de lagrangiano de interação expressa em termos dos campos. A interação entre campos quânticos relativísticos se dá via correntes conservadas de Noether e a ideia de potencial é inadequada para representar estas interações. Entretanto, há um desejo de obter potenciais de interação para estudo de processos físicos macroscópicos a baixas energias para usufruir da vasta experiência analítica e computacional para resolver problemas em Mecânica Quântica Não Relativística.

Seria conveniente utilizar a Teoria Quântica de Campos para obter potenciais mantendo o formalismo dos diagramas de Feynman, evitando aproximações não-relativísticas *a priori* e garantindo a invariância de calibre e de Lorentz.

É possível obter o potencial no espaço das configurações a partir de um método iterativo em função da amplitude de transição [34]. Em diagramas tree-level, onde é

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

trocada apenas uma partícula (segunda ordem na constante de acoplamento), o potencial no espaço das configurações é a transformada de Fourier da amplitude no espaço dos momenta com respeito ao momento transferido $\vec{q}$

$$V(\vec{r}) = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \mathcal{M}(\vec{q}) \quad (3.0.1)$$

onde $\vec{q}$ é o momento transferido, $\vec{r}$ é o vetor posição relativa entre as fontes e $\mathcal{M}$ é a amplitude de espalhamento, avaliada com campos externos on-shell. Esta expressão é o limite não-relativístico da amplitude de Feynman.

A amplitude de espalhamento da interação entre duas partículas possui uma estrutura operacional do tipo

$$\mathcal{M} = (\text{vértice})_1 \langle \text{propagador} \rangle (\text{vértice})_2$$

onde temos as correntes de matéria das partículas 1 e 2 e o propagador da interação.

Podemos tratar do espalhamento elástico entre duas partículas, 1 e 2, com momentos inicial e final p_1, p'_1 e p_2, p'_2 respectivamente, no referencial do centro de massa (CM) do sistema. Neste caso, temos

$$\begin{aligned} p_1 &= (E, \vec{p}) & p_2 &= (E, -\vec{p}) \\ p'_1 &= (E', \vec{p}') & p'_2 &= (E', -\vec{p}') \end{aligned}$$

Neste referencial, podemos escrever os momentos das partículas em termos dos momentos total e transferido, definidos respectivamente como

$$P = \frac{1}{2}(p + p') \quad (3.0.2)$$

$$q = p - p' \quad (3.0.3)$$

de modo que o processo de espalhamento considerado pode ser representado pelo diagrama de Feynman abaixo onde são ilustrados os momentos envolvidos.

As energias E e E' se referem à mesma partícula e se trata de uma colisão elástica,

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

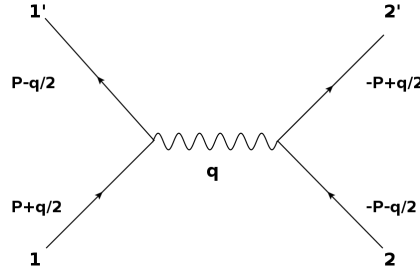


Figura 3.1.: Espalhamento $1 + 2 \rightarrow 1' + 2'$

onde massa e energia cinética são conservadas. Esta condição nos diz que $|\vec{p}| = |\vec{p}'|$, nos dando

$$E_1^2 = E_1'^2 = \vec{p}^2 + m_1^2$$

$$E_2^2 = E_2'^2 = \vec{p}^2 + m_2^2$$

$$q = (0, \vec{p} - \vec{p}') = (0, \vec{q})$$

De modo semelhante, vemos que $\vec{P} \cdot \vec{q} = 0$.

3.1. Interação entre férmions via bóson escalar

Consideraremos nesta seção a interação entre partículas de spin 1/2 mediada por um bóson escalar massivo. Neste caso, o bóson apenas acopla-se aos vértices escalar e pseudo-escalar de Dirac.

Determinaremos primeiro a expressão de ambos os vértices e posteriormente calcularemos os potenciais de interação.

3.1.1. Vértice escalar

O vértice escalar de Dirac é dado pela seguinte expressão, a menos do propagador

$$g_s \bar{u}(p') u(p), \quad (3.1.1)$$

onde g_s é a constante de acoplamento do vértice.

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Utilizando as seguintes definições

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.2)$$

$$u = \begin{pmatrix} \xi \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \xi \end{pmatrix}; \quad u^\dagger = \left(\xi^\dagger \quad \xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}'}{E'+m} \right) \quad (3.1.3)$$

podemos escrever o vértice escalar da seguinte forma

$$\begin{aligned} g_s \bar{u}(p') u(p) &= g_s u^\dagger \gamma_0 u \\ &= g_s \left(\xi^\dagger \xi - \xi^\dagger \frac{\sigma_i p'_i \sigma_j p_j}{4m^2} \xi \right), \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

onde m é a massa do férmion.

Considerando o produto de matrizes σ

$$\sigma_i \sigma_j = i\epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij},$$

desenvolvemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \sigma_i p'_i \sigma_j p_j &= \sigma_i \sigma_j p'_i p_j \\ &= (i\epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij}) p'_i p_j \\ &= i\epsilon_{ijk} p'_i p_j \sigma_k + p'_i p_i \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Substituindo este resultado em (3.1.4), temos

$$\begin{aligned} g_s \bar{u}(p') u(p) &= g_s \left(\xi^\dagger \xi - \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger (i\epsilon_{ijk} p'_i p_j \sigma_k + p'_i p_i) \xi \right) \\ &= g_s \left[\delta - \frac{1}{4m^2} (i\epsilon_{ijk} p'_i p_j \langle \sigma \rangle_k + \delta p'_i p_i) \right], \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

onde consideramos $\xi^\dagger \xi = \delta = 1$ caso o spin do férmion se mantenha e $\xi^\dagger \xi = \delta = 0$ caso contrário, e $\xi^\dagger \sigma \xi = \langle \sigma \rangle$.

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Substituindo p' e p em termos de P e q , temos

$$\begin{aligned} g_s \bar{u}(p') u(p) &= g_s \left\{ \delta - \frac{1}{4m^2} \left[i\epsilon_{ijk} \left(P_i - \frac{q_i}{2} \right) \left(P_j + \frac{q_j}{2} \right) \langle \sigma \rangle_k + \delta \left(P_i - \frac{q_i}{2} \right) \left(P_i + \frac{q_i}{2} \right) \right] \right\} \\ &= g_s \left\{ \delta - \frac{1}{4m^2} \left[\frac{i\epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \sigma \rangle_k}{2} - \frac{i\epsilon_{ijk} q_i P_j \langle \sigma \rangle_k}{2} + \delta \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

Neste último passo utilizamos as condições $\vec{P} \cdot \vec{q} = 0$ e $\epsilon_{ijk} P_i P_j = \epsilon_{ijk} q_i q_j = 0$, sendo esta última uma consequência do produto entre o tensor antissimétrico e os vetores P e q , que são simétricos.

Podemos fazer ainda a seguinte consideração

$$\epsilon_{ijk} q_i P_j \stackrel{i \leftrightarrow j}{=} \epsilon_{jik} q_j P_i = -\epsilon_{ijk} P_i q_j$$

no segundo termo em colchetes para obtermos

$$g_s \bar{u}(p') u(p) = g_s \left\{ \delta - \frac{1}{4m^2} \left[i\epsilon_{ijk} P_i q_j \sigma_k + \delta \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\} \quad (3.1.7)$$

Esta expressão também pode ser escrita na notação vetorial

$$g_s \bar{u}(p') u(p) = g_s \left\{ \delta - \frac{1}{4m^2} \left[i\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \sigma \rangle + \delta \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\} \quad (3.1.8)$$

3.1.2. Vértice pseudo-escalar

O vértice pseudo-escalar de Dirac, a menos do propagador, pode ser representado da seguinte forma

$$g_p \bar{u}(p') i\gamma_5 u(p), \quad (3.1.9)$$

onde g_p é a constante de acoplamento do vértice pseudo-escalar.

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Podemos reescrever este vértice utilizando (3.1.2) e (3.1.3)

$$\begin{aligned} g_p \bar{u}(p') i\gamma_5 u(p) &= i g_p u^\dagger \gamma^0 \gamma_5 u \\ &= i g_p \left(\xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2m} \xi - \xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}'}{2m} \xi \right) \end{aligned}$$

Substituindo $\vec{p}$ e $\vec{p}'$ em termos de $\vec{P}$ e $\vec{q}$, temos

$$\begin{aligned} g_p \bar{u}(p') i\gamma_5 u(p) &= \frac{i g_p}{2m} \xi^\dagger \left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{P} + \frac{\vec{q}}{2} \right) - \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2} \right) \right] \xi \\ &= \frac{i g_p}{4m} \langle \sigma \rangle \cdot \vec{q}. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Com as componentes explicitadas

$$g_p \bar{u}(p') i\gamma_5 u(p) = \frac{i g_p}{4m} \langle \sigma \rangle_i q_i \quad (3.1.11)$$

3.1.3. Interação entre vértices escalares

O potencial de interação entre dois vértices escalares é

$$V_{E-E} = - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} (\text{vértice})_1 (\text{vértice})_2,$$

onde neste caso os vértices são ambos escalares (3.1.8) e m_0 é a massa do bóson escalar trocado.

$$\begin{aligned} V_{E-E} &= -g_s^1 g_s^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left\{ \delta_1 - \frac{1}{4m_1^2} \left[i\epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k + \delta_1 \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\} \\ &\quad \times \left\{ \delta_2 - \frac{1}{4m_2^2} \left[i\epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n + \delta_2 \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Explicitando o produto de todos os termos

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

$$V_{E-E} = -g_s^1 g_s^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left\{ \delta_1 \delta_2 \right. \quad (3.1.12)$$

$$- \left(\frac{\delta_1}{4m_2^2} i\epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n + \frac{\delta_2}{4m_1^2} i\epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \right) \quad (3.1.13)$$

$$- \left[\frac{\delta_1 \delta_2}{4} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \right] \quad (3.1.14)$$

$$- \left(\frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \right) \quad (3.1.15)$$

$$+ \frac{i}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) (\delta_2 \epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k + \delta_1 \epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n) \quad (3.1.16)$$

$$+ \frac{\delta_1 \delta_2}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right)^2 \left. \right\} \quad (3.1.17)$$

Para resolver as integrais (3.1.12)-(3.1.17), iremos utilizar os resultados do apêndice B.

A integral (3.1.12) é do tipo da equação (B.0.1). Portanto, temos

$$-g_s^1 g_s^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \delta_1 \delta_2 = -g_s^1 g_s^2 \delta_1 \delta_2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi} \quad (3.1.18)$$

A integral (3.1.13) é do tipo da equação (B.0.2). Portanto, temos

$$\begin{aligned} & -g_s^1 g_s^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left(-\frac{\delta_1}{4m_2^2} i\epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n - \frac{\delta_2}{4m_1^2} i\epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \right) \\ &= \frac{ig_s^1 g_s^2}{4} \left[\left(\frac{\delta_1}{m_2^2} \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_m \right) + \left(\frac{\delta_2}{m_1^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_j \right) \right] \\ &= \frac{ig_s^1 g_s^2}{4} \left[\left(\frac{\delta_1}{m_2^2} \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \frac{i}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} r_m (1 + m_0 r) \right) + \left(\frac{\delta_2}{m_1^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \frac{i}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} r_j (1 + m_0 r) \right) \right] \\ &= -\frac{g_s^1 g_s^2 e^{-m_0 r}}{16\pi r^3} (1 + m_0 r) \left(\frac{\delta_1}{m_2^2} \vec{P} \times \vec{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + \frac{\delta_2}{m_1^2} \vec{P} \times \vec{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \\ &= -\frac{g_s^1 g_s^2 e^{-m_0 r}}{16\pi r^2} (1 + m_0 r) \left(\frac{\delta_1}{m_2^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + \frac{\delta_2}{m_1^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

A integral (3.1.14) é do tipo das equações (B.0.1) e (B.0.3). Portanto, temos

$$\begin{aligned}
&= g_s^1 g_s^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} - \frac{1}{4} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_i \right) \\
&= g_s^1 g_s^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \vec{P}^2 + \frac{1}{4} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_i r_i (m_0 r^2 + 3m_0 r + 3) - 3r^2 (1 + m_0 r)] \right) \\
&= g_s^1 g_s^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{16\pi r} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0}{4} \right) e^{-m_0 r} \tag{3.1.20}
\end{aligned}$$

A integral (3.1.15) é do tipo da equação (B.0.3). Portanto, temos

$$\begin{aligned}
&g_s^1 g_s^2 \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_j q_m \\
&= g_s^1 g_s^2 \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \left[-\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_j r_m (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\
&\quad \left. - r^2 \delta_{jm} (1 + m_0 r)] \right] \\
&= -\frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[\epsilon_{ijk} P_i r_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l r_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\
&\quad \left. - r^2 \epsilon_{ijk} \epsilon_{lmn} \vec{P}_i \vec{P}_l \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \right]
\end{aligned}$$

O produto de dois tensores de Levi-Civita com um índice repetido é

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{lmn} = \delta_{il} \delta_{kn} - \delta_{in} \delta_{kl}.$$

Substituindo este resultado, temos

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[\epsilon_{ijk} P_i r_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l r_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\
&\quad \left. - r^2 (\delta_{il} \delta_{kn} - \delta_{in} \delta_{kl}) \vec{P}_i \vec{P}_l \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \right] \\
&-\frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \left[\left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\
&\quad \left. + \left(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) - \left(\vec{P}^2 \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) \right] \tag{3.1.21}
\end{aligned}$$

A integral (3.1.16) possui um termo $q_i q_i = \vec{q}^2$. Como vimos em (3.1.20), este termo, após feita a integração, torna-se $-m_0^2$. Neste caso, a integral (3.1.16) pode ser resolvida

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

com auxílio da equação (B.0.2)

$$\begin{aligned}
& -g_s^1 g_s^2 \frac{i}{16m_1^2 m_2^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) (\delta_2 \epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k + \delta_1 \epsilon_{lmn} P_l q_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n) \\
& = -g_s^1 g_s^2 \frac{i}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \left[\delta_2 \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \left(\frac{ie^{-m_0 r}}{4\pi r^3} r_j (m_0 r + 1) \right) \right. \\
& \quad \left. + \delta_1 \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \left(\frac{ie^{-m_0 r}}{4\pi r^3} r_m (m_0 r + 1) \right) \right] \\
& = g_s^1 g_s^2 \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} (m_0 r + 1) \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \left[\delta_2 \vec{P} \times \vec{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle + \delta_1 \vec{P} \times \vec{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \\
& = g_s^1 g_s^2 \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (m_0 r + 1) \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \left[\delta_2 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle + \delta_1 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \quad (3.1.22)
\end{aligned}$$

A integral (3.1.17) também possui termos do tipo $q_i q_i = \vec{q}^2$. Fazendo a mesma consideração que em (3.1.22), e utilizando o resultado (B.0.1), temos

$$\begin{aligned}
& -g_s^1 g_s^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{16m_1^2 m_2^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right)^2 \\
& = -g_s^1 g_s^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \quad (3.1.23)
\end{aligned}$$

Substituindo os resultados de (3.1.18), (3.1.19), (3.1.20), (3.1.21), (3.1.22) e (3.1.23) na expressão do potencial e rearranjando os termos, temos o potencial entre dois vértices escalares

$$\begin{aligned}
V_{E-E} = & -g_s^1 g_s^2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi} \left\{ \frac{\delta_1 \delta_2}{r} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) + \frac{1}{16} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 \frac{1}{m_1^2 m_2^2} \right] \right. \\
& + \frac{(m_0 r + 1)}{4} \frac{1}{r^2} \left[\frac{\delta_1}{m_2^2} \left(1 - \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right. \\
& \quad \left. + \frac{\delta_2}{m_1^2} \left(1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right] \\
& + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{1}{r^3} \left[\left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\
& \quad \left. + \left(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) - \vec{P}^2 \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left. \right\} \quad (3.1.24)
\end{aligned}$$

3.1.4. Interação entre um vértice escalar e um pseudoescalar

A interação entre um vértice escalar (3.1.8) e um vértice pseudoescalar (3.1.10)

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

$$V_{E-PE} = -g_s^1 g_p^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left\{ \delta_1 - \frac{1}{4m_1^2} \left[i\epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k + \delta_1 \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right\} \\ \times \left\{ \frac{i}{4m_2} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m q_m \right\}$$

Realizando o produto entre todos os termos, temos

$$V_{E-PE} = -g_s^1 g_p^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left\{ \frac{\delta_1 i}{4m_2} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m q_m \right. \quad (3.1.25)$$

$$+ \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i q_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m q_m \quad (3.1.26)$$

$$\left. - \frac{\delta_1 i}{16m_1^2 m_2^2} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m q_m \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right\} \quad (3.1.27)$$

Iremos analisar as integrais separadamente.

A integral (3.1.25) é do tipo (B.0.2), portanto resulta em

$$-g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1 i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{4m_2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_m = -g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1 i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{4m_2} \left(\frac{i}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} r_m (1 + m_0 r) \right) \\ = g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1}{4m_2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1 + m_0 r) \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} \quad (3.1.28)$$

A integral (3.1.26) é do tipo (B.0.3), portanto resulta em

$$-g_s^1 g_p^2 \frac{\epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{16m_1^2 m_2^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_j q_m \\ = -g_s^1 g_p^2 \frac{\epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{16m_1^2 m_2^2} \left(-\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[r_j r_m (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{jm} (1 + m_0 r) \right] \right) \\ = g_s^1 g_p^2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \left\{ \frac{\epsilon_{ijk} P_i r_j \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k r_m \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{16m_1^2 m_2^2 r^2} (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\ \left. + \frac{\epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_j}{16m_1^2 m_2^2} (1 + m_0 r) \right\} \\ = g_s^1 g_p^2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left[\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} \right) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \\ \left. - \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \times \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} (1 + m_0 r) \right] \quad (3.1.29)$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

A integral (3.1.27) é do tipo (B.0.4), mas com um termo $\vec{q}^2$. Neste caso, a integral simplifica-se para (B.0.2) onde fazemos a substituição $-\vec{q}^2 = m_0^2$. Portanto,

$$\begin{aligned}
& g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1 i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{16 m_1^2 m_2^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_m \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \\
&= g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1 i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_m}{16 m_1^2 m_2^2} \left[\frac{i e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} r_m (m_0 r + 1) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \\
&= -g_s^1 g_p^2 \frac{\delta_1 \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r}}{16 m_1^2 m_2^2} \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (m_0 r + 1) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \quad (3.1.30)
\end{aligned}$$

Utilizando os resultados (3.1.28), (3.1.29) e (3.1.30), o potencial entre um vértice escalar e um pseudo-escalar fica

$$\begin{aligned}
V_{E-PE} = & g_s^1 g_p^2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi} \left\{ \frac{\delta_1}{4m_2^2} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} (m_0 r + 1) \frac{1}{r^2} \left[1 - \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
& - \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \frac{1}{r^3} \left[(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \times \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}) (1 + m_0 r) \right. \\
& \left. \left. - (\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r}) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right] \right\} \quad (3.1.31)
\end{aligned}$$

3.1.5. Interação entre vértices pseudoescalares

A interação entre dois vértices pseudo-escalares (3.1.10)

$$\begin{aligned}
V_{PE-PE} = & -g_p^1 g_p^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left\{ \frac{i}{4m_1} \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_i q_i \right\} \left\{ \frac{i}{4m_2} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_j q_j \right\} \\
& = \frac{\langle \vec{\sigma}_1 \rangle_i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_j}{16m_1 m_2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j
\end{aligned}$$

Utilizando o resultado da integral (B.0.3), temos o potencial

$$\begin{aligned}
V_{PE-PE} = & \frac{\langle \vec{\sigma}_1 \rangle_i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_j}{16m_1 m_2} \left[-\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r)] \right] \\
& = \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \frac{1}{16m_1 m_2} \left[(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (1 + m_0 r) \right. \\
& \quad \left. - (\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \hat{r}) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r}) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right] \quad (3.1.32)
\end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

3.2. Interações entre férmions via bóson vetorial

Nesta seção trataremos do potencial de interação entre férmions mediado por um bóson vetorial. Este pode ser determinado pelos seus acoplamentos permitidos, o que significa uma corrente conservada; neste caso, o bóson vetorial pode acoplar-se aos vértices vetorial e pseudo-vetorial de Dirac.

Determinaremos primeiro a expressão de ambos os vértices e posteriormente calcularemos os potenciais de interação.

3.2.1. Vértice vetorial

O vértice vetorial de Dirac é

$$g_V \bar{u}(p') \gamma^\mu u(p), \quad (3.2.1)$$

onde g_V é a constante de acoplamento que depende da natureza do férmion descrito.

Usamos novamente as definições

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$u = \begin{pmatrix} \xi \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \xi \end{pmatrix}; \quad u^\dagger = \left(\xi^\dagger \quad \xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}'}{E'+m} \right)$$

Podemos explicitar a componente temporal utilizando as relações acima

$$\begin{aligned} J_V^0 &= g_V \bar{u} \gamma^0 u = g_V u^\dagger \gamma^0 \gamma^0 u = g_V u^\dagger u \\ &= g_V \left[\xi^\dagger \xi + \xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}'}{E' + m} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + m} \xi \right] \\ &= g_V \left[\delta + \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger (\sigma_i p'_i \sigma_j p_j) \xi \right], \end{aligned}$$

onde consideramos $\xi^\dagger \xi = \delta = 1$ se o spin da partícula 1 se mantiver e 0 se não.

Utilizamos a propriedade das matrizes de pauli

$$\sigma_i \sigma_j = i \epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij},$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

para obtermos a componente temporal

$$\begin{aligned}
J_V^0 &= g_V \bar{u} \gamma^0 u = g_V \left\{ \delta + \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger [i\epsilon_{ijk} p'_i p_j \sigma_k + \delta_{ij} p'_i p_j] \xi \right\} \\
&= g_V \left\{ \delta + \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger [i\epsilon_{ijk} (P_i - q_i/2)(P_j + q_j/2) \sigma_k + (P_i - q_i/2)(P_i + q_i/2)] \xi \right\} \\
&= g_V \left\{ \delta \left[1 + \frac{1}{4m^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] + \frac{i}{4m^2} (\vec{P} \times \vec{q}) \cdot \langle \vec{\sigma} \rangle \right\}, \tag{3.2.2}
\end{aligned}$$

onde definimos $\xi^\dagger \vec{\sigma} \xi = \langle \vec{\sigma} \rangle$

As componentes espaciais

$$\begin{aligned}
J_V^i &= g_V \bar{u} \gamma^i u = g_V u^\dagger(p') \gamma^0 \gamma^i u(p) \\
&= g_V \frac{1}{2m} \left[\xi^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}') \sigma_i \xi + \xi^\dagger \sigma_i (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \xi \right] \\
&= g_V \frac{1}{2m} \left[\xi^\dagger \sigma_j p'_j \sigma_i \xi + \xi^\dagger \sigma_i \sigma_l p_l \xi \right] \\
&= g_V \frac{1}{2m} [\xi^\dagger (i\epsilon_{jik} p'_j \sigma_k + \delta_{ij} p'_j) \xi + \xi^\dagger (i\epsilon_{ilm} p_l \sigma_m + \delta_{il} p_l) \xi] \\
&= g_V \frac{1}{2m} \left\{ \xi^\dagger \left[i\epsilon_{jik} \left(P_j - \frac{q_j}{2} \right) \sigma_k + \left(P_i - \frac{q_i}{2} \right) \right] \xi \right. \\
&\quad \left. + \xi^\dagger \left[i\epsilon_{ilm} \left(P_l + \frac{q_l}{2} \right) \sigma_m + \left(P_i + \frac{q_i}{2} \right) \right] \xi \right\} \\
J_V^i &= g_V \bar{u} \gamma^i u = g_V \frac{1}{2m} \left[i \left(\vec{q} \times \langle \vec{\sigma} \rangle \right)_i + 2P_i \delta \right]. \tag{3.2.3}
\end{aligned}$$

3.2.2. Vértice pseudo-vetorial

O vértice pseudo-vetorial de Dirac é

$$g_{PV} \bar{u} \gamma^\mu \gamma_5 u \tag{3.2.4}$$

A sua componente temporal, considerando (3.2.4), é

$$\begin{aligned}
J_{PV}^0 &= g_{PV} \bar{u}(p') \gamma^0 \gamma_5 u(p) = g_{PV} u^\dagger(p') \gamma^0 \gamma^0 \gamma_5 u(p) \\
&= g_{PV} u^\dagger(p') \gamma_5 u(p) \\
&= g_{PV} \left[\xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} + \frac{\vec{q}}{2})}{2m} \xi + \xi^\dagger \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2})}{2m} \xi \right] \\
&= g_{PV} \frac{\langle \vec{\sigma} \rangle \cdot \vec{P}}{m} \tag{3.2.5}
\end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

As suas componentes espaciais são

$$\begin{aligned} J_{PV}^i &= g_{PV} \bar{u}(p') \gamma^i \gamma_5 u(p) = g_{PV} \left\{ \xi^\dagger \vec{\sigma}_i \xi + \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}') \vec{\sigma}_i (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \xi \right\} \\ &= g_{PV} \left\{ \xi^\dagger \vec{\sigma}_i \xi + \frac{1}{4m^2} \xi^\dagger \left(\sigma_j p'_j \sigma_i \sigma_k p_k \right) \xi \right\} \end{aligned}$$

Desenvolvendo a expressão

$$\begin{aligned} \sigma_j p'_j \sigma_i \sigma_k p_k &= \sigma_j \sigma_i \sigma_k p'_j p_k \\ &= [i\epsilon_{jil} \sigma_l + \delta_{ji}] \sigma_k p'_j p_k \\ &= i\epsilon_{jil} \sigma_l \sigma_k p'_j p_k + \sigma_k p'_i p_k \\ &= i\epsilon_{jil} [i\epsilon_{lkm} \sigma_m + \delta_{lk}] p'_j p_k + \sigma_k p'_i p_k \\ &= -\epsilon_{jil} \epsilon_{lkm} \sigma_m p'_j p_k + i\epsilon_{jil} p'_j p_l + \sigma_k p'_i p_k \\ &= -[\delta_{jk} \delta_{im} - \delta_{jm} \delta_{ik}] \sigma_m p'_j p_k + i\epsilon_{jil} p'_j p_l + \sigma_k p'_i p_k \\ &= \sigma_j p'_j p_i - \sigma_i p'_k p_k + i\epsilon_{jil} p'_j p_l + \sigma_k p'_i p_k \\ &= (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}') p_i - \sigma_i \vec{p}' \cdot \vec{p} - i(\vec{p}' \times \vec{p})_i + (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) p'_i \\ &= \left[\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2} \right) \right] \left(P_i + \frac{q_i}{2} \right) - \sigma_i \left(\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2} \right) \cdot \left(\vec{P} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \\ &\quad - i \left[\left(\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2} \right) \times \left(\vec{P} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \right]_i + \sigma \cdot \left(\vec{P} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \left(P_i - \frac{q_i}{2} \right) \\ &= 2(\vec{\sigma} \cdot \vec{P}) P_i - 2 \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{q}}{4} \right) q_i - \sigma_i \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) - i(\vec{P} \times \vec{q})_i \end{aligned}$$

Portanto, as componentes espaciais ficam da forma

$$\begin{aligned} J_{PV}^i &= g_{PV} \bar{u} \gamma^i \gamma_5 u = g_{PV} \left\{ \left[1 - \frac{1}{4m^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \langle \vec{\sigma}_i \rangle - \frac{i\delta}{4m^2} (\vec{P} \times \vec{q})_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma} \rangle) \vec{P}_i - \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma} \rangle}{4} \vec{q}_i \right] \right\} \quad (3.2.6) \end{aligned}$$

3.2.3. Interação entre vértices vetoriais

Antes de calcularmos o potencial de interação entre vértices vetoriais, precisamos fazer algumas considerações sobre o propagador de um bóson vetorial.

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

O propagador de um bóson vetorial de massa m_0 é dado pela expressão

$$\langle \mathcal{P}_{\mu\nu} \rangle = -\frac{i}{q^2 - m_0^2} \eta_{\mu\nu} + i \left(\frac{1}{q^2 - m_0^2} - \frac{\alpha}{q^2} \right) \frac{q_\mu q_\nu}{q^2}. \quad (3.2.7)$$

Nesta tese vamos considerar o propagador no gauge de Feynman ($\alpha = 1$), resultando na expressão

$$\langle \mathcal{P}_{\mu\nu} \rangle = -\frac{i\eta_{\mu\nu}}{q^2 - m_0^2} \quad (3.2.8)$$

Trabalhando no referencial do centro de massa, teremos o potencial

$$\begin{aligned} V &= - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} (\text{vértice})_1^\mu \eta_{\mu\nu} (\text{vértice})_2^\nu \\ &= - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} (\text{vértice})_1^\mu (\text{vértice})_{2\mu} \\ &= - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \left[(\text{vértice})_1^0 (\text{vértice})_{2;0} - (\text{vértice})_1^i (\text{vértice})_{2;i} \right] \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Neste caso, estamos analisando ambos os vértices vetoriais.

Desenvolvendo o produto das componentes temporais, utilizando o resultado (3.2.2) e sua contrapartida para a partícula 2, obtemos

$$\begin{aligned} J_{1V}^0 J_{2V}^0 &= g_V^1 g_V^2 \left\{ \delta_1 \delta_2 \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right)^2 \right] \right. \\ &\quad + \frac{i}{4} \left[\frac{\delta_1}{m_2^2} (\vec{P} \times \vec{q}) \cdot \langle \vec{\sigma} \rangle_2 \left(1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta_2}{m_1^2} (\vec{P} \times \vec{q}) \cdot \langle \vec{\sigma} \rangle_1 \left(1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Desenvolvendo o produto das componentes espaciais, utilizando o resultado (3.2.3)

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

e sua contrapartida para a partícula 2, obtemos

$$\begin{aligned}
J_{1V}^i J_{2V}^i &= g_V^1 g_V^2 \left\{ \frac{1}{2m_1} \left[i(\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle)_i + 2P_i \delta_1 \right] \right\} \left\{ \frac{1}{2m_2} \left[i(\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_2 \rangle)_i + 2P_i \delta_2 \right] \right\} \\
&= g_V^1 g_V^2 \frac{1}{4m_1 m_2} \left\{ \left[(\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) - \vec{q}^2 \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \right. \\
&\quad \left. + i \left[\delta_2 \vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle + \delta_1 \vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] + 4\vec{P}^2 \delta_1 \delta_2 \right\} \quad (3.2.11)
\end{aligned}$$

Aplicando estes resultados na equação (3.2.9), temos

$$V_{V-V} = \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\vec{q}^2 + m_0^2} (J_{1V}^0 J_{2V}^0) - \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\vec{q}^2 + m_0^2} (J_{1V}^i J_{2V}^i).$$

Considerando as integrais do apêndice B, o termo contendo as componentes temporais fica

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\vec{q}^2 + m_0^2} (J_{1V}^0 J_{2V}^0) &= g_V^1 g_V^2 \left\{ \delta_1 \delta_2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 \right] \right. \\
&\quad - \frac{\delta_1 e^{-m_0 r}}{16\pi r^3 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_k r_j (1 + m_0 r) \left(1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \Big] \\
&\quad - \frac{\delta_2 e^{-m_0 r}}{16\pi r^3 m_1^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k r_j (1 + m_0 r) \left(1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \Big] \\
&\quad \left. + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \epsilon_{ijk} P_i \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_k \epsilon_{lmn} P_l \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_n \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_j r_m (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{jm} (1 + m_0 r)] \right\}
\end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{1}{\vec{q}^2 + m_0^2} (J_{1V}^0 J_{2V}^0) &= g_V^1 g_V^2 \left[\delta_1 \delta_2 \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 \right\} \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} \left\{ \frac{(1+m_0 r)}{4} \left(1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \left[\frac{\delta_1}{m_2^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + \frac{\delta_2}{m_1^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right] \right\} \right. \\
&\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \left\{ \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left[(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + (1+m_0 r) \left[\vec{P}^2 \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle - (\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \right] \right] \right\} \right] \quad (3.2.12)
\end{aligned}$$

O termo contendo as componentes espaciais fica

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{1}{\vec{q}^2 + m_0^2} (J_{1V}^i J_{2V}^i) &= \frac{g_V^1 g_V^2}{4m_1 m_2} \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} 4\delta_1 \delta_2 \vec{P}^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1+m_0 r) \left[\delta_2 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle + \delta_1 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \left[\left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) (1+m_0 r) - \left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \hat{r} \right) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} \right) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right] \right\} \quad (3.2.13)
\end{aligned}$$

Portanto, o potencial da interação entre dois vértices escalares é

$$\begin{aligned}
V_{V-V} &= g_V^1 g_V^2 \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \delta_1 \delta_2 \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 - \frac{\vec{P}^2}{m_1 m_2} \right] \right. \\
&\quad - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1+m_0 r) \left[\frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \left[\frac{\delta_1}{m_2^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + \frac{\delta_2}{m_1^2} \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right] \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{4m_1 m_2} \left(\delta_2 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle + \delta_1 \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) \right] \right. \\
&\quad + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \frac{1}{4m_1 m_2} \left[(m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[\frac{1}{4m_1 m_2} (\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \hat{r} \right) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. \left. + (1+m_0 r) \left[\frac{1}{4m_1 m_2} \left\{ \vec{P}^2 \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle - (\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) (\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \right\} - \left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) \right] \right] \right\} \quad (3.2.14)
\end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

3.2.4. Interação entre um vértice vetorial e um pseudo-vetorial

Consideramos a expressão para o potencial (3.2.9) onde o vértice 1 é vetorial e o vértice 2 é pseudo-vetorial.

O resultado do produto das componentes temporais é

$$\begin{aligned}
 J_{1V}^0 J_{2PV}^0 &= g_V^1 g_{PV}^2 \left\{ \delta_1 \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] + \frac{i}{4m_1^2} \vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right\} \left\{ \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}}{m_2} \right\} \\
 &= g_V^1 g_{PV}^2 \left\{ \delta_1 \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}}{m_2} \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{i}{4m_1^2 m_2} \left(\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \right) \right\} \quad (3.2.15)
 \end{aligned}$$

O resultado do produto das componentes espaciais é

$$\begin{aligned}
 J_{1V}^i J_{2PV}^i &= g_V^1 g_{PV}^2 \frac{1}{2m_1} \left\{ i \left(\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right)_i + 2P_i \delta_1 \right\} \left\{ \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_i \left[1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) P_i - \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} q_i \right] - \frac{i\delta_2}{4m_2^2} (\vec{P} \times \vec{q})_i \right\} \\
 &= g_V^1 g_{PV}^2 \frac{1}{2m_1} \left\{ \left[i\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + 2\delta_1 \vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left[1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
 &\quad + \frac{i}{2m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) + \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{q}) \right] \\
 &\quad + \frac{\delta_2}{4m_2^2} (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) \cdot (\vec{P} \times \vec{q}) - \frac{i\delta_1 \delta_2}{2m_2^2} \vec{P} \times \vec{q} \cdot \vec{P} \\
 &\quad \left. + \frac{\delta_1}{m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \vec{P}^2 - \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} \vec{q} \cdot \vec{P} \right] \right\} \\
 &= g_V^1 g_{PV}^2 \frac{1}{2m_1} \left\{ \left[i\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + 2\delta_1 \vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left[1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
 &\quad + \frac{i}{2m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) \right] \\
 &\quad + \frac{\delta_2}{4m_2^2} (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle) \cdot (\vec{P} \times \vec{q}) \\
 &\quad \left. + \frac{\delta_1}{m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \vec{P}^2 - \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} \vec{q} \cdot \vec{P} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

$$\begin{aligned}
&= g_V^1 g_{PV}^2 \frac{1}{2m_1} \left\{ \left[i\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle + 2\delta_1 \vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left[1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
&\quad + \frac{i}{2m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (\vec{q} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) \right] \\
&\quad - \frac{\delta_2}{4m_2^2} \left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P} \right) \vec{q}^2 \\
&\quad \left. + \frac{\delta_1}{m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \vec{P}^2 - \frac{\vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} \vec{q} \cdot \vec{P} \right] \right\} \quad (3.2.16)
\end{aligned}$$

Portanto, o potencial devido a interação entre um vértice escalar e outro pseudo-escalar é, conforme (3.2.9)

$$\begin{aligned}
V_{V-PV} &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} J_V^0 J_{PV}^0 - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} J_V^i J_{PV}^i \\
&= g_V^1 g_{PV}^2 \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \delta_1 \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}}{m_2} \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \right. \\
&\quad - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1 + m_0 r) \frac{1}{4m_1^2 m_2} \left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \right) \\
&\quad - \frac{1}{2m_1} \left[\left[- \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1 + m_0 r) \hat{r} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right. \right. \\
&\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} 2\delta_1 \vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left[1 - \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \\
&\quad - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1 + m_0 r) \frac{1}{2m_2^2} \left[(\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) (\hat{r} \times \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) \right] \\
&\quad + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \frac{\delta_2}{m_2^2} \left(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P} \right) m_0^2 \\
&\quad + \frac{\delta_1}{m_2^2} \left[\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} (\vec{P} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle) \vec{P}^2 + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \frac{\hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle}{4} \hat{r} \cdot \vec{P} \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} (1 + m_0 r) \frac{1}{4} \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \right] \right\} \quad (3.2.17)
\end{aligned}$$

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Agrupando termos comuns por ordem do denominador do fator exponencial, temos

$$\begin{aligned}
 V_{V-PV} = g_V^1 g_{PV}^2 & \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \left[\delta_1 \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left(1 + \frac{1}{4m_1 m_2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{1}{2m_1 m_2^2} \left((\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}) \delta_1 \vec{P}^2 + (\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) \delta_2 m_0^2 \right) \right] \right. \\
 & \quad - \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} \left[\frac{(1+m_0 r)}{4m_1 m_2} \left(\vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \right) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \right) \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \right. \\
 & \quad \quad \left. \left. + \frac{(1+m_0 r)}{2m_1} \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \times \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r} \right] \right. \\
 & \quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \frac{\delta_1}{8m_1 m_2^2} \left[(m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left(\hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right) \left(\hat{r} \cdot \vec{P} \right) \right. \right. \\
 & \quad \quad \left. \left. + (1+m_0 r) \left(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P} \right) \right] \right\} \quad (3.2.18)
 \end{aligned}$$

3.2.5. Interação entre dois vértices pseudo-vetoriais

O resultado do produto das componentes temporais

$$\begin{aligned}
 J_{1PV}^0 J_{2PV}^0 &= g_{PV}^1 g_{PV}^2 \left\{ \frac{\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}}{m_1} \right\} \left\{ \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}}{m_2} \right\} = g_{PV}^1 g_{PV}^2 \\
 &= g_{PV}^1 g_{PV}^2 \frac{(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P})(\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P})}{m_1 m_2} \quad (3.2.19)
 \end{aligned}$$

O resultado do produto das componentes espaciais

$$\begin{aligned}
 J_{1PV}^i J_{2PV}^i &= -g_{PV}^1 g_{PV}^2 \left\{ \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_i \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] - i(\vec{P} \times \vec{q})_i \frac{\delta_1}{4m_1^2} \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}}{2m_1^2} P_i - \frac{\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{q}}{8m_1^2} q_i \right\} \left\{ \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_i \left[1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \right. \\
 & \quad \left. - i(\vec{P} \times \vec{q})_i \frac{\delta_2}{4m_2^2} + \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}}{2m_2^2} P_i - \frac{\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{q}}{8m_2^2} q_i \right\} \quad (3.2.20)
 \end{aligned}$$

Omitiremos os cálculos intermediários nesta etapa devido suas extensões e apre-

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

sentaremos apenas o resultado para este termo

$$\begin{aligned}
J_{1PV}^i J_{2PV}^i = & -g_{PV}^1 g_{PV}^2 \left\{ -\vec{P}^2 \vec{q}^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{16m_1^2 m_2^2} + (\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) + \frac{\vec{P}^2}{4m_1^2 m_2^2} \right] \right. \\
& + \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right)^2 \right] \\
& - i\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \frac{\delta_2}{4m_2^2} \\
& - i\vec{P} \times \vec{q} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \left[1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right] \frac{\delta_1}{4m_1^2} \\
& - (\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{q}) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{q}) \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) + \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4} \right) \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} \vec{q}^2 \right] \right\} \quad (3.2.21)
\end{aligned}$$

Obtemos assim o potencial de interação de dois vértices pseudo-vetoriais

$$\begin{aligned}
V_{PV-PV} = & \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} J_{PV}^0 J_{PV}^0 - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} J_{PV}^i J_{PV}^i \\
= & -g_{PV}^1 g_{PV}^2 \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \left\{ -\vec{P}^2 m_0^2 \frac{\delta_1 \delta_2}{16m_1^2 m_2^2} \right. \right. \\
& + (\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \vec{P}) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \vec{P}) \left[-\frac{1}{m_1 m_2} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) + \frac{\vec{P}^2}{4m_1^2 m_2^2} \right] \right. \\
& + \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) + \frac{1}{16m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right)^2 \right] \left. \right\} \\
& + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^2} (1 + m_0 r) \left\{ \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \left[1 + \frac{1}{4m_1^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \frac{\delta_2}{4m_2^2} \right. \\
& \left. + \vec{P} \times \hat{r} \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \left[1 + \frac{1}{4m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) \right] \frac{\delta_1}{4m_1^2} \right\} \\
& + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^3} \left\{ \frac{1}{4} \left[(\langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \hat{r}) (\langle \vec{\sigma}_2 \rangle \cdot \hat{r}) (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \right. \right. \\
& \left. \left. - (1 + m_0 r) \langle \vec{\sigma}_1 \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_2 \rangle \right] \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} \left(\vec{P}^2 + \frac{m_0^2}{4} \right) + \frac{1}{4m_1^2 m_2^2} m_0^2 \right] \right\} \quad (3.2.22)
\end{aligned}$$

3.3. Considerações do capítulo

Potenciais de interação são em geral relacionados a forças macroscópicas de longo alcance, como a eletromagnética e a gravitacional. Estas forças de longo alcance podem estar ausentes em interações comuns, mas podem ser acessíveis em experimentos na escala de laboratório. Podem indicar a presença de novas interações fundamentais, como no caso dos axions e a teoria de Peccei-Quinn, ou de interações existentes principalmente em sistemas complexos ou de matéria condensada onde há a presença de quasi-partículas ou pseudo-partículas.

No caso das forças macroscópicas descritas por meio de uma teoria microscópica, como é o caso proposto neste capítulo, a massa da partícula mediadora da interação determina também a ordem de grandeza do seu alcance $\frac{1}{m_0} \propto r$.

Por exemplo, um bóson mediador leve, com massa na ordem de 10^{-5} eV, teria um comprimento de onda macroscópico aproximadamente de $\lambda = 2$ cm e poderia mediar forças em escala macroscópica, como proposto em experimentos em [37] para detecção de axions.

Podemos perceber que o termo de primeira ordem na interação entre dois vértices escalares é totalmente independente do spin dos férmions. Este tipo de interação é identificado como sendo interação entre monopolos. O mesmo ocorre no termo temporal da interação entre dois vértices vetoriais. Os termos de ordens superiores são dependentes da velocidade e também do spin dos férmions. Termos dependentes da velocidade devem ser considerados com cautela pois podem apresentar divergência no ultra-violeta. No caso do grafeno, a velocidade de Fermi é muito inferior à velocidade da luz ($v_F \sim 10^6$ m/s = $0.003c$).

A interação entre dois vértices pseudo-escalares bem como os termos de primeira ordem da interação entre dois vértices pseudo-vetoriais são totalmente dependentes do spin dos férmions interagentes. Este tipo de interação é identificado como sendo interação entre dipolos. Termos de ordem superior em geral dependem do spin, mas também da velocidade dos férmions. Forças de longo alcance dependentes do spin em geral são do tipo monopolo-dipolo e dipolo-dipolo. Forças do tipo monopolo-dipolo contém o termo $\langle \vec{\sigma} \rangle \cdot \hat{r}$ que viola P e T, o que não foi observado macroscopicamente.

3. Obtenção de potenciais de interação a partir de diagramas de Feynman

Entretanto, termos de ordens superiores desta mesma interação que são do tipo $\vec{P} \times \langle \vec{\sigma} \rangle \cdot \hat{r}$ conservam P e T.

Utilizamos o formalismo descrito neste capítulo para determinar os potenciais utilizados nos cálculos computacionais. Neste primeiro estágio, implementamos um algoritmo apenas com potenciais tipo dipolo-dipolo e monopolo-monopolo não dependentes da velocidade. Desta maneira, analisamos a influência do spin dos férmions e da massa do bóson de Kekulé proposto em propriedades magnéticas e termodinâmicas do grafeno. Em um segundo estágio deste trabalho, pretendemos aprimorar o algoritmo para contemplar termos de ordens superiores dependentes da velocidade e novos potenciais devido a diferentes tipos de interações. Mais considerações sobre o futuro deste trabalho estão descritas no capítulo 5.

4. Modelagem computacional do grafeno planar e cálculo de propriedades físicas de interações não-relativísticas

Neste capítulo apresentaremos os trabalhos originais desenvolvidos durante o período de 2012 até o presente que englobam os esforços deste autor e de todo o grupo de pesquisa neste processo de doutoramento.

A seção 4.1 refere-se ao artigo já publicado com o título “Scalar-Interchange Potential and Magnetic/Thermodynamic Properties of Graphene-like Materials” no periódico **Journal of Advances in Physics** vol. 9 nº 2. E-print disponível no arXiv cond-mat.mes-hall 1409.0238 <https://arxiv.org/abs/1409.0238> .

A seção 4.2 refere-se ao artigo submetido para publicação no periódico **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** entitulado “Physical Properties of Graphene-like Samples with Kekulé and Vacuum Polarization Corrections”. E-print disponível no arXiv cond-mat.mes-hall 1607.03529 <https://arxiv.org/abs/1607.03529> .

4. Modelagem computacional do grafeno

4.1. Potenciais de interação escalares e propriedades

magnéticas/termodinâmicas de materiais tipo grafeno

Recentemente, materiais como o grafeno e suas propriedades estão atraindo muito interesse na área teórica, de modelagem e experimental. Em particular, as propriedades do grafeno e materiais similares tem sido investigadas em profundidade por diferentes métodos (veja [29, 64] para revisões recentes). É importante obtermos propriedades mecânicas, elétricas, magnéticas e termodinâmicas de diferentes superfícies de carbono. Um dos problemas está relacionado com o fato de que a superfície do grafeno real não é perfeitamente plana e, portanto, suas propriedades físicas podem depender da geometria da superfície e suas deformações. Introduzir a curvatura na descrição do grafeno é um passo relevante na direção de uma compreensão mais ampla entre as possíveis geometrias da superfície e as propriedades físicas mensuráveis destas estruturas. Atualmente, o efeito da geometria na Física da Matéria Condensada representa uma área de pesquisa ativa e, em particular, é possível observar um interesse da comunidade científica no cálculo dos efeitos de curvatura em materiais como o grafeno [15, 27, 56, 65]. Neste artigo, nós propusemos o uso de um dos principais métodos da Teoria de Campos Quânticos para descrever a curvatura da superfície, descrevendo-a fenomenologicamente através de um campo escalar massivo. O inverso da massa deste campo caracteriza o alcance típico que este campo escalar propaga-se a outros pontos desta mesma superfície.

O tipo de curvatura, ou inomogeneidade, na estrutura cristalina do grafeno conhecido como textura de Kekulé foi discutido previamente no capítulo 2. O propósito deste trabalho foi considerar os efeitos de interações dependentes do spin devido a troca de um bóson vetorial e um bóson escalar massivo, que chamamos de bóson de Kekulé.

4.1.1. Métodos computacionais

Utilizando métodos numéricos, simulamos o comportamento de diferentes classes de potenciais de interação em função de condições internas e externas dos sistema investigado. Métodos computacionais, em particular o método de Monte Carlo, permite

4. Modelagem computacional do grafeno

analisar o comportamento de sistemas em função de variações do campo externo, temperatura e o tipo de excitações que geram os potenciais de auto-interação. Estamos na verdade contemplando situações que envolvem bósons escalares, vetoriais e tensoriais que podem representar uma física mais fundamental por trás da abordagem semi-microscópica [35, 36, 66]. Neste trabalho, focamos no caso particular de um bóson escalar massivo, doravante chamado escalar de Kekulé. Em futuras investigações, pretendemos investigar a possibilidade do gradiente deste escalar de Kekulé estar associado a um campo vetorial massivo com interação dependente do spin que resulta da troca de bósons vetoriais.

Modelamos um sistema com a estrutura cristalina do grafeno dotado de propriedades magnéticas não triviais. Isto significa que cada sítio possui um momento magnético fixo que interagem entre si por interações tipo Heisenberg e dipolo-dipolo. Além disso, assumimos que inomogeneidades na estrutura cristalina produzem uma contribuição extra para a interação, que pode ser descrita por um bóson escalar intermediário, como especificado pela equação (4.1.1).

Pelo método descrito acima, exploramos as configurações de spin, magnetização em equilíbrio térmico, susceptibilidade magnética e calor específico da estrutura escolhida. Como resultado, podemos observar como estas propriedades dependem da massa do bóson escalar. O hamiltoniano correspondente tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 H = & -\vec{B} \cdot \sum_i \vec{S}_i - \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \tilde{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{e^{-\xi r_{ij}}}{4\pi r_{ij}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \\
 & - \omega \sum_{i < j} \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{e}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{e}_{ij}) - (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)}{r_{ij}^3} \\
 & - \tilde{\omega} \sum_{i < j} \frac{(3 + 3\xi r_{ij} + \xi^2 r_{ij}^2)(\vec{S}_i \cdot \vec{e}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{e}_{ij}) - (1 + \xi r_{ij})(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)}{4\pi r_{ij}^3} e^{-\xi r_{ij}}
 \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Os termos dos potenciais utilizados neste hamiltoniano foram escolhidos com base nos potenciais gerados no capítulo 3, observando termos de primeira ordem do tipo monopolo-monopolo e dipolo-dipolo independentes da velocidade.

O primeiro termo na primeira linha representa o acoplamento dos spins a um campo

4. Modelagem computacional do grafeno

magnético externo, B . No termo em parênteses da primeira linha da equação acima, o primeiro somatório duplo representa a interação de troca ferromagnética entre primeiros vizinhos com uma constante de acoplamento J e o segundo somatório representa a influência do bóson escalar na interação de troca entre os sítios, com constante de acoplamento $\tilde{J}$. A segunda linha da equação acima corresponde ao termo de interação entre dipolos magnéticos, com constante de acoplamento ω e a terceira linha representa a influência do bóson escalar na interação entre dipolos magnéticos, com constante de acoplamento $\tilde{\omega}$.

Os termos $\vec{S}_i$ são momentos magnéticos tridimensionais de módulo unitário, e_{ij} são vetores unitários na direção que une os sítios i e j e r_{ij} representa a distância entre os sítios i e j . As quantidades ω e $\tilde{\omega}$ são consideradas constantes de acoplamento para os termos de interação entre dipolos magnéticos. O parâmetro ξ é a massa do bóson escalar. Assumimos a relação entre as constantes $\omega/J = 0,001$ conforme a referência [67] e $\omega = \tilde{\omega}$, $J = \tilde{J}$.

Antes de descrevermos detalhes das simulações, vamos apresentar algumas motivações para a introdução do potencial dependente do spin decorrente da troca do bóson escalar massivo. A ideia é baseada no trabalho [52], no qual os autores estudaram as consequências de uma distorção local de Kekulé, ou seja, uma distorção de Kekulé diferente em cada ponto do plano. Para este propósito, um campo escalar extra foi introduzido. O papel deste escalar de Kekulé foi explorado em grande detalhe nos trabalhos [54, 68–70].

Nossa proposta é que este escalar seja um grau de liberdade que se acopla aos elétrons e resulta em uma interação efetiva, que é dependente do spin e possui massa ξ . A forma explícita para a obtenção deste potencial foi detalhada no trabalho de Dobrescu e Mocioiu [36]. Portanto, em nosso cenário este campo escalar de Kekulé fica encarregado de representar as imperfeições das camadas de grafeno.

Assumimos que o campo magnético externo é ortogonal ao plano da estrutura. As simulações para a magnetização e susceptibilidade magnética foram realizadas para os valores $B = -20, -18, \dots, -8, -7.9, -7.8, \dots, 0, \dots, 7.8, 7.9, 8, \dots, 18, 20$. Aqui, a energia e o campo magnético aplicado são expressos em unidades de J . A temperatura é expressa em unidade de J/k , onde J é a magnitude da constante de acoplamento e k é a

4. Modelagem computacional do grafeno

constante de Boltzmann. Em todos os casos, a temperatura escolhida foi $T=0,2$. Para estudar regiões de baixas temperaturas, todas as simulações foram realizadas para temperaturas essencialmente menores do que a temperatura crítica. A escolha de $t = 0,2$ fornece uma rápida convergência do procedimento de Monte Carlo para o sistema de interesse.

Obtivemos a susceptibilidade χ (ao longo do eixo OZ) utilizando o método Monte Carlo através da expressão

$$\chi = \frac{1}{kTN} \left(\langle m_z^2 \rangle - \langle m_z \rangle^2 \right), \quad (4.1.2)$$

onde N é o número de spins do sistema e $\langle m_z \rangle$ é a magnetização média por spin na direção z .

O calor específico foi obtido através da relação de flutuações de energia

$$C = \frac{1}{kT^2N} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right), \quad (4.1.3)$$

onde $\langle E \rangle$ é a energia média por spin. Para calcular o calor específico, utilizamos $B=0$ e os valores $T = 5.000, T = 4.975, 4.950, \dots, 0.050$.

4.1.2. Resultados

Os resultados em equilíbrio térmico obtido pelas simulações Monte Carlo permite observar a dependência do calor específico e da susceptibilidade magnética em função da temperatura. Enfatizamos que os cálculos foram realizados para valores do campo magnético externo e temperatura especificados na seção 4.1.1. Os gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo externo para diferentes valores de ξ estão exibidos nas figuras 4.4, 4.5 e 4.6. Os gráficos do calor específico em função da temperatura estão exibidos nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9. Analizando as figuras 4.4, 4.5 e 4.6, podemos visualizar que a susceptibilidade da estrutura analisada depende da massa da partícula escalar. O máximo da curva cai no mesmo valor do campo magnético externo para falore de ξ de 0.50 até 0.75; para valores de 0.80 até 1.00, o máximo da curva se desloca para a esquerda no sentido crescente do campo magnético. Há dois picos nos gráficos cujas posições se deslocam no sentido decrescente do campo externo, com

4. Modelagem computacional do grafeno

valor crescente da massa do bóson escalar entre 0.80 e 1.00 que permanece constante para valores menores de ξ .

Se considerarmos que ξ é um parâmetro que de certa forma mede a blindagem do potencial, então valores pequenos de ξ correspondem a uma blindagem fraca e longo alcance de interação. Em nossos resultados, observamos que para blindagens mais fortes o deslocamento dos picos é mais significativo com a variação do campo externo aplicado.

Analisando as figuras 4.7, 4.8 e 4.9, podemos compreender como a temperatura crítica da nanoestrutura magnética depende do valor de ξ . Observamos que a temperatura crítica aumenta com um aumento do valor da massa do bóson escalar. Podemos ver que a linha para a massa nula do bóson escalar, que corresponde a um grafeno perfeitamente planar, é muito diferente das linhas onde há curvaturas na superfície. A linha correspondente a $\xi = 0$ no gráfico é fortemente desviada para a direita em relação às outras. Além disso, podemos observar a presença de dois picos distintos, como podemos ver na figura 4.9. Podemos ver que com o aumento da massa do bóson escalar, há um deslocamento no sentido crescente de temperatura. O desvio relativo entre as linhas próximo ao primeiro pico (temperatura aproximadamente 0.2) é mais acentuado do que próximo ao segundo pico (temperatura aproximadamente 0.4). Podemos ver que para valores elevados da massa do bóson escalar, com valores de ξ variando de 0.85 a 1.00 (ver figura 4.7), o desvio é maior do que para valores menores da massa, como por exemplo entre 0.50 e 0.80 (ver figura 4.8).

Os gráficos da magnetização em função do campo magnético aplicado são exibidos nas figuras 4.1, 4.2 e 4.3. Podemos notar que a magnetização varia com o aumento da massa do bóson escalar de forma que, para valores maiores de ξ (correspondentes a potenciais de menor alcance), as variações na magnetização são mais suaves sobre uma grande variação de valores do campo magnético. Quanto menor o valor de ξ , maior o alcance do potencial, portanto o gráfico da magnetização tende a ser mais vertical e se torna menos sensível à variação do campo magnético.

4. Modelagem computacional do grafeno

4.1.3. Gráficos

Magnetização

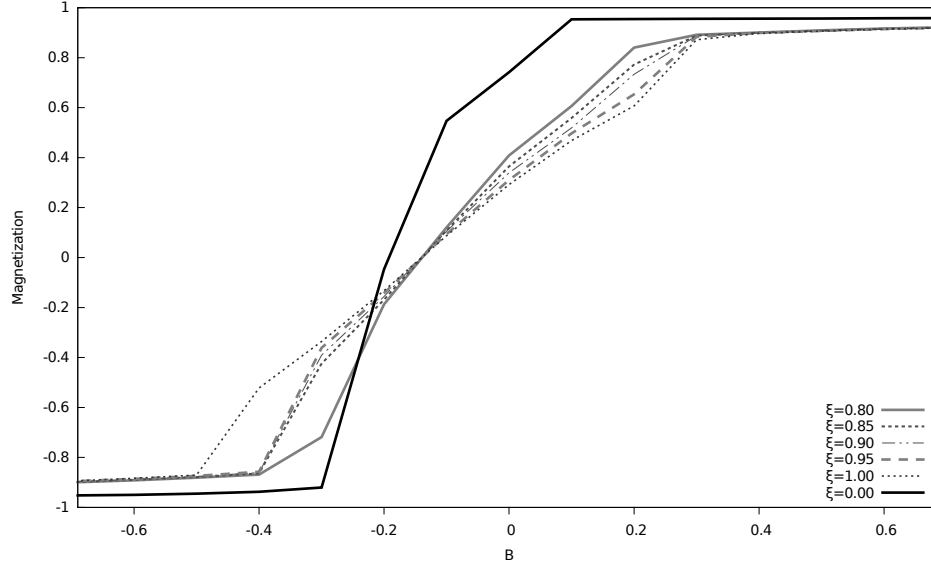


Figura 4.1.: Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.

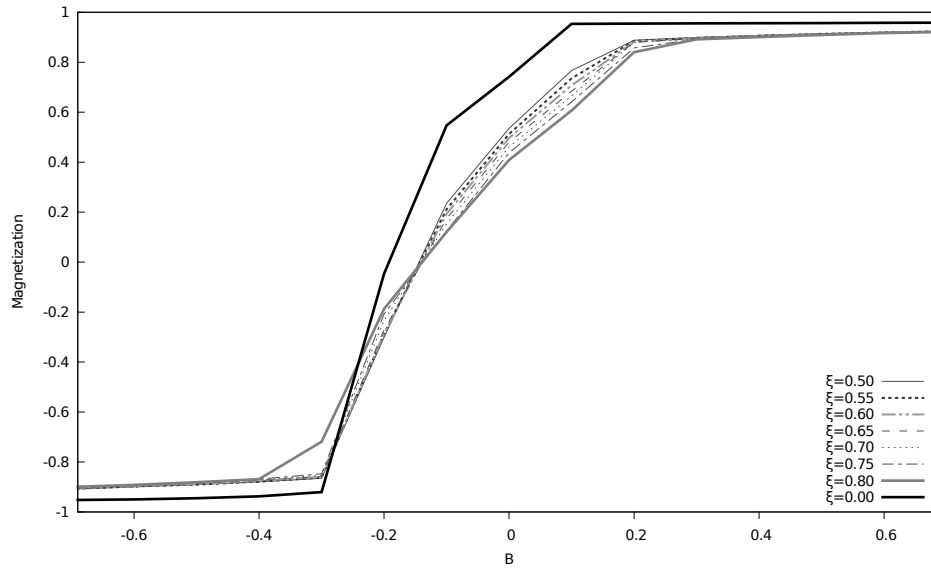


Figura 4.2.: Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.

4. Modelagem computacional do grafeno

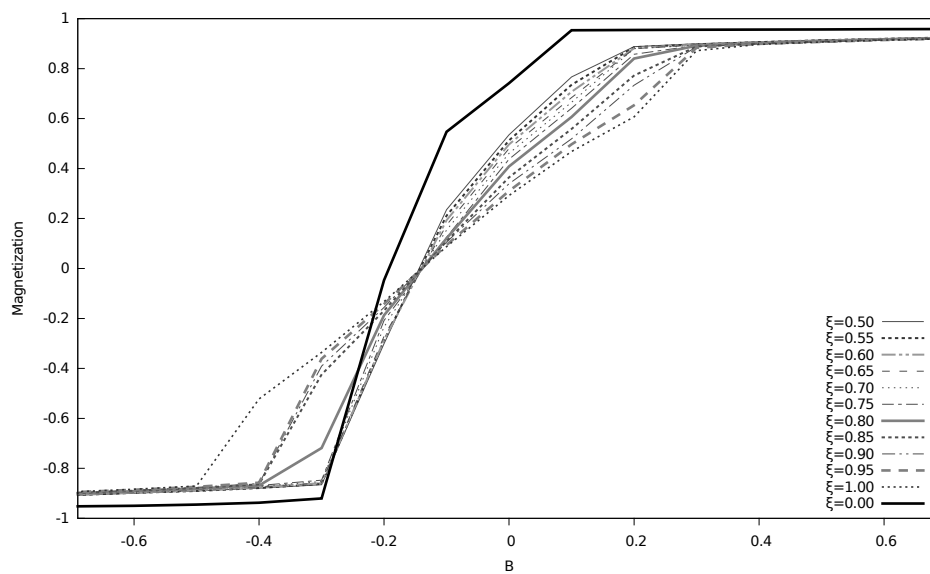


Figura 4.3.: Gráfico da magnetização em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.

4. Modelagem computacional do grafeno

Susceptibilidade magnética

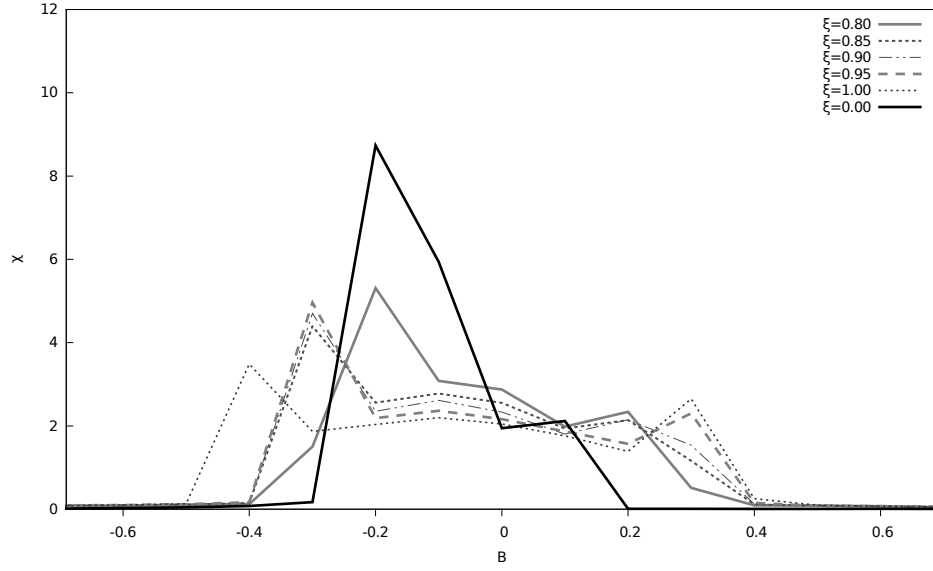


Figura 4.4.: Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.

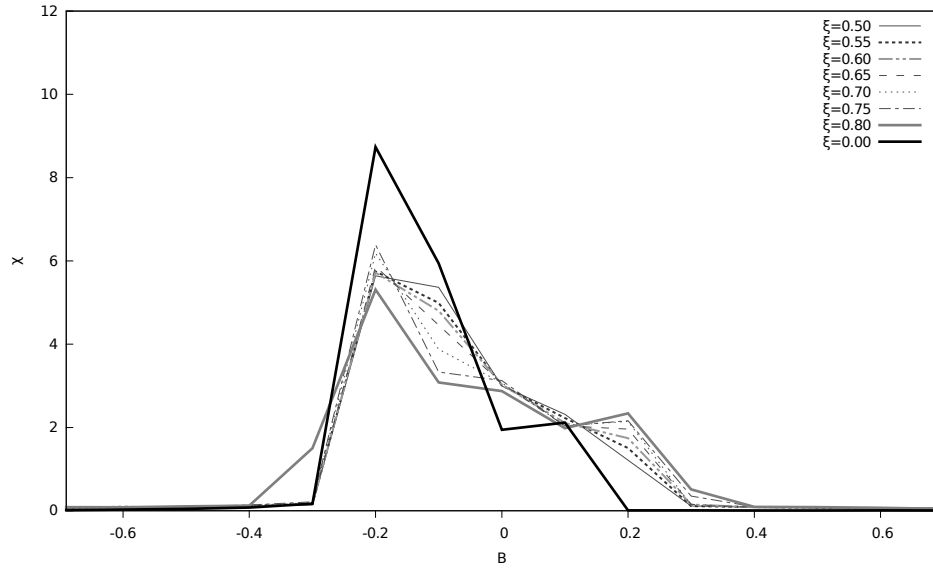


Figura 4.5.: Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.

4. Modelagem computacional do grafeno

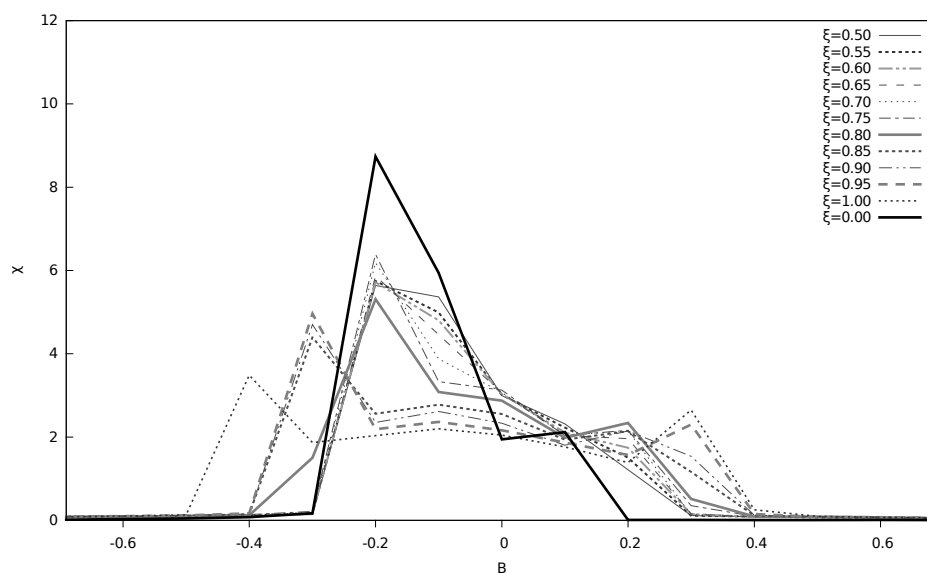


Figura 4.6.: Gráfico da susceptibilidade magnética em função do campo externo para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.

4. Modelagem computacional do grafeno

Calor Específico

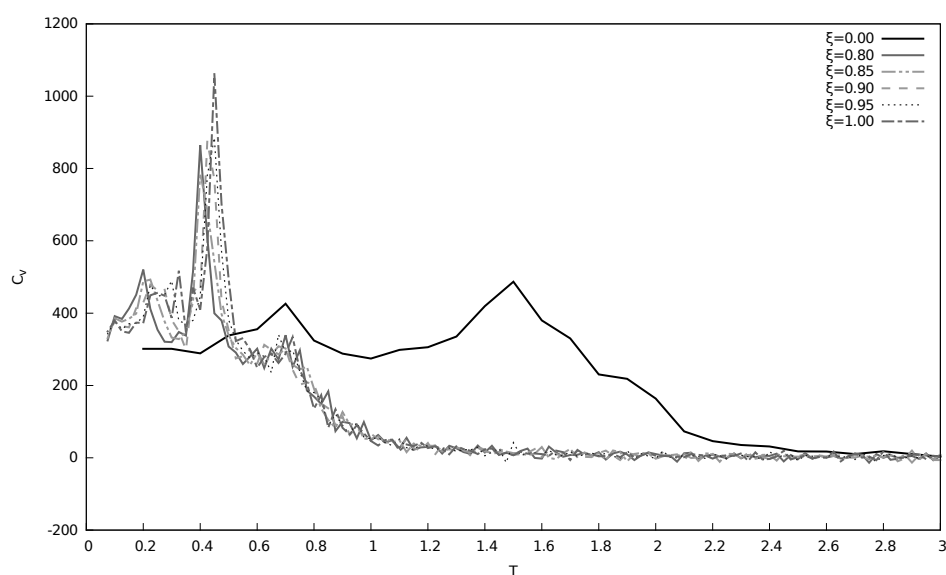


Figura 4.7.: Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.80 e 1.00.

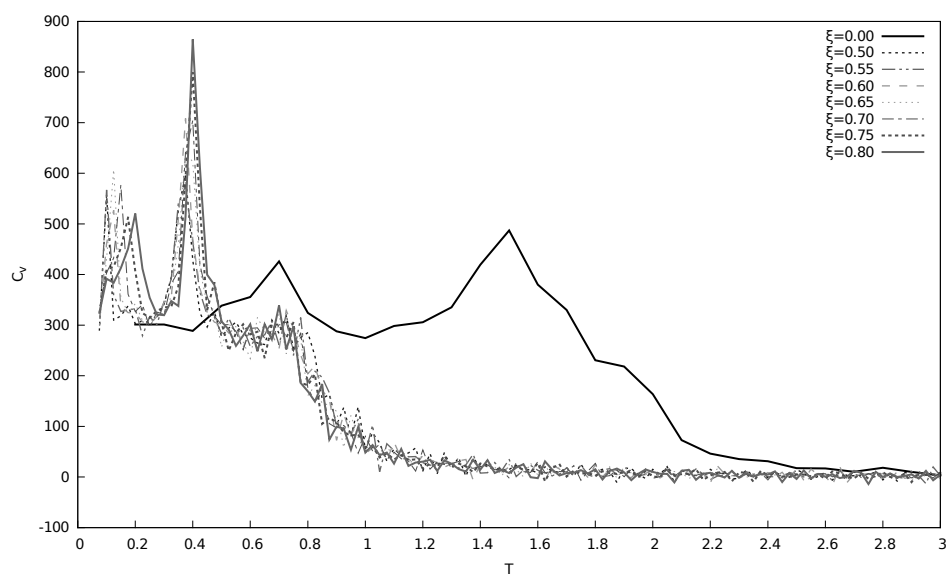


Figura 4.8.: Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.50 e 0.80.

4. Modelagem computacional do grafeno

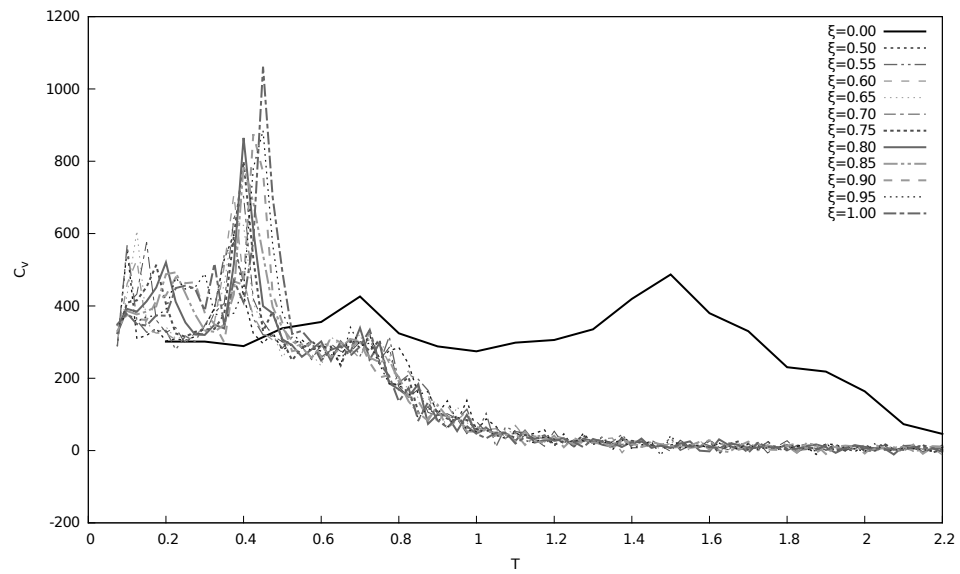


Figura 4.9.: Gráfico do calor específico em função da temperatura para valores de ξ entre 0.50 e 1.00.

4. Modelagem computacional do grafeno

4.1.4. Conclusões

Nós investigamos algumas propriedades termodinâmicas e magnéticas de um sistema tipo grafeno em uma situação onde as deformações de Kekulé são descritas por um campo escalar massivo. A troca deste escalar da origem a um potencial dependente do spin. Indicamos como o calor específico e a magnetização comportam-se sob variações de ξ . A interação eletromagnética se faz presente por meio da interação entre dipolos magnéticos. Ao mesmo tempo, a interação tipo Coulomb adquire uma forma tipo Yukawa devido a troca do escalar massivo. Finalmente, há uma interação spin-spin dada pelo hamiltoniano (4.1.1). Nossa conclusão geral é que as deformações de Kekulé podem ocasionar mudanças sensíveis nas propriedades físicas do grafeno, competindo com a interação puramente eletromagnética para aumentar a estabilidade da estrutura do grafeno contra repulsões eletromagnéticas. Nossa conclusão final é que estes efeitos de curvatura da superfície podem ser descritos por meios de um campo escalar massivo, que introduz termos adicionais de interação no hamiltoniano. Utilizando este método, pudemos calcular as propriedades físicas das nanoestruturas. O uso deste método não aumentou significativamente o tempo computacional.

Os resultados para a susceptibilidade estão apresentados em módulo. Entretanto, apresentaram valores negativos, indicando diamagnetismo da estrutura, o que está de acordo com a teoria vigente para o grafeno [16].

4.2. Propriedades física de materiais tipo grafeno com correções de Kekulé e de polarização do vácuo

Grafeno e materiais de estrutura eletrônica similares são de muito interesse para cientistas e engenheiros de todas as áreas em virtude de suas propriedades inusitadas e importantes [15, 22, 49, 71]. Em particular, as propriedades físicas destes materiais foram exploradas extensivamente tanto no seu aspecto teórico quanto no aspecto experimental pelos mais diferentes métodos (para reviews recentes, veja [24, 26, 29, 47, 64]).

Um dos aspectos mais interessantes do grafeno de um ponto de vista teórico é sua relação muito próxima com a Teoria Quântica de Campos (TQC) [13, 55, 72, 73]. Esta conexão surge do fato que a relação de dispersão é linear próxima dos pontos de Dirac (também chamados de vales, e são pontos onde há o cruzamento entre as bandas de condução e de valência). Este comportamento leva ao aparecimento de excitações de baixa energia descritas por uma equação de Dirac bidimensional para partículas sem massa, com uma velocidade muito inferior à da luz (experimentalmente $v_F \sim c/300$). O aparecimento de anomalias quânticas na rede hexagonal do grafeno é um exemplo desta conexão [13]. Há um número grande de estudos abordando questões fundamentais no âmbito das anomalias quânticas [13, 72], mais recentemente na relação entre a TQC e o número fermiônico fracionário [14, 53, 54, 74–76].

O grafeno não apresenta uma superfície perfeitamente plana e suas propriedades física dependem da sua geometria específica e de deformações, imperfeições da rede cristalina e também se a estrutura possui uma forma oca, como uma esfera, um elipsoide ou um tubo (como fulerenos e nanotubos de carbono) [27, 55, 65].

No trabalho [52], Chamon discute a possibilidade de descrever a curvatura de um nanotubo de carbono como uma simetria contínua $U(1)$ e as suas implicações relacionadas à textura de Kekulé no plano do grafeno. Esta textura são oscilações naturais nos comprimentos das ligações de carbono que simultaneamente esticam-se e comprimem-se respectivamente em ligações alternadas. Seus resultados foram corroborados por [77]. Nas referências [53, 68], esta ideia é aprofundada. No trabalho de [54], Jackiw e Pi descrevem como a distorção em uma rede bidimensional (chamada

4. Modelagem computacional do grafeno

distorção de Peierls) pode ser representada por um acoplamento do campo de Dirac a um campo escalar massivo, que é uma medida da distorção da rede. Eles associam este campo escalar à textura de Kekulé, como mostrado nos trabalhos anteriores de Chamon et al. para desenvolver uma teoria quiral do grafeno.

A partir dos estudos de formação de vórtices em [53], o resultado de uma teoria quiral do grafeno apresenta uma estrutura espinorial que não é modificada pela adição de um potencial vetorial de gauge quiral acoplado com os férmions. De fato, este acoplamento promove o aparecimento de campos magnéticos no grafeno, com corroboração experimental e teórica na descrição de deformações elásticas e no estudo da formação de defeitos topológicos com influência nas propriedades eletrônicas do grafeno [25, 26, 28, 50, 58, 78–83].

No cenário experimental, é possível observar (a partir da medição de níveis de Landau) campos pseudomagnéticos intensos (de até 300T) devido a tensões na estrutura do grafeno [81]. É possível medir, utilizando microscopia eletrônica de tunelamento, interferência do tipo Aharonov-Bohm devido a deformações locais na rede cristalina [58]. Um estudo detalhado de campos de gauge no grafeno pode ser encontrado em [26]. A partir de deformações elásticas, a emergência de defeitos topológicos em um substrato curvo é representada por um hamiltoniano não relativístico para o grafeno, e alguns efeitos nas propriedades eletrônicas do grafeno são discutidas em [82, 83].

Nós exploramos a ideia de que algumas imperfeições na superfície do grafeno podem ser descritas por um campo escalar massivo e propusemos que este escalar representa um grau de liberdade que acopla elétron e resulta em uma interação efetiva que é dependente do spin e possui um parâmetro, ξ , que é a massa do bóson trocado que chamaremos doravante de partícula de Kekulé.

Neste trabalho, simulamos as propriedades físicas (calor específico, magnetização e susceptibilidade magnética) a baixas temperaturas, em uma rede cristalina de spins no grafeno sob a influência de potenciais de interação dados pela interação com correção de polarização do vácuo e também devido à troca do bóson de Kekulé, que representa uma medida da imperfeição da estrutura cristalina. Para isto, utilizamos potenciais de interação não-relativísticos obtidos da interação entre férmions mediada pelo bóson de Kekulé em um procedimento inicialmente descrito por Sucher e Feinberg [32–35] e

4. Modelagem computacional do grafeno

desenvolvido por Moody e Wilczek [37] e por Dobrescu e Mocioiu [36]. Descrevemos este método no capítulo 3 e sugerimos também as referências [38, 39].

Desta forma, é possível obter potenciais de interação necessários para simular as propriedades físicas do grafeno que desejamos explorar considerando o espalhamento elétron-elétron mediado por um bóson de Kekulé. Também comparamos os resultados com os trabalhos de [41, 84], onde o calor específico e a susceptibilidade do grafeno foram analisados teoricamente utilizando métodos de grupo de renormalização e correção gaussiana para baixas temperaturas.

4.2.1. Métodos computacionais

Nós modelamos uma rede cristalina de grafeno com 288 sítios para simular o comportamento de um modelo de Heisenberg clássico, no qual cada sítio contém um momento magnético livre para girar nas 3 direções espaciais, mas a rede possui uma estrutura bidimensional plana. A curvatura da superfície é representada na interação por meio do escalar de Kekulé. Em cada sítio, o spin interage com seus primeiros vizinhos por interações tipo Heisenberg e tipo dipolo-dipolo.

Utilizamos o método Monte Carlo com o algoritmo Metropolis [30, 85, 86]. Escolhemos este método devido a sua capacidade de obter um macro-estado de equilíbrio de um sistema físico com muitos graus de liberdade acoplados (tal como modelos de Potts e suas generalizações, como o modelo de Heisenberg) a uma dada temperatura T . Escolhemos um micro-estado inicial e realizamos um grande número de transformações aleatórias através de um procedimento determinístico até atingirmos um macro-estado de equilíbrio. O micro-estado inicial escolhido em todas as simulações fora um arranjo de spins todos paralelos na rede cristalina. Então aleatoriamente mudamos esta configuração e avaliamos a mudança na energia do sistema deste novo micro-estado e comparamos com a configuração anterior. Se $\Delta E > 0$, este micro-estado substitui o anterior com uma probabilidade $e^{-\Delta E/k_b T}$; senão, é descartado. Em simulações preliminares, avaliamos que o número de passos necessários para garantir que o estado de equilíbrio tivesse sido alcançado como sendo na ordem de $n = 10^4$ por cada sítio na rede e usamos este número de passos em todos os nossos cálculos. O estado final corresponde à configuração estável e foi interpretada como macro-estado de equilíbrio.

4. Modelagem computacional do grafeno

Utilizando o método descrito acima, nós obtivemos as configurações de spin, magnetização no equilíbrio térmico, susceptibilidade magnética e calor específico do sistema. O hamiltoniano utilizado para o sistema foi

$$\begin{aligned}
 H = & -\vec{B} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i - \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \tilde{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{e^{-\xi r_{ij}}}{4\pi r_{ij}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \\
 & - \omega \sum_{i < j} \frac{(\vec{S}_i \cdot \hat{e}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{e}_{ij}) - (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)}{r_{ij}^3} \\
 & - \tilde{\omega} \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{(3 + 3\xi r_{ij} + \xi^2 r_{ij}^2)(\vec{S}_i \cdot \hat{e}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{e}_{ij}) - (1 + \xi r_{ij})(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)}{4\pi m^2 r_{ij}^3} \\
 & + \frac{\alpha}{r_{ij}^2} \sum_{i < j} \left(1 + \frac{\alpha}{4\pi} \frac{e^{-2mr_{ij}}}{(mr_{ij})^{3/2}} \right). \tag{4.2.1}
 \end{aligned}$$

Os termos dos potenciais utilizados neste hamiltoniano foram escolhidos com base nos potenciais gerados no capítulo 3, observando termos de primeira ordem do tipo monopolo-monopolo e dipolo-dipolo independentes da velocidade.

No primeiro termo na primeira linha, o somatório representa o acoplamento dos spins a um campo magnético externo B . Os termos dentro dos parênteses representam o termo de troca ferromagnético entre os primeiros vizinhos devido à troca de um fóton e ao escalar de Kekulé respectivamente, com constantes de acoplamento J e $\tilde{J}$. Na segunda linha temos o termo da interação dipolo-dipolo magnético (chamado também de acoplamento dipolar) devido à interação eletromagnética com intensidade ω . Na terceira linha, o termo representa o acoplamento dipolar devido à troca do bóson escalar com intensidade $\tilde{\omega}$. O termo da quarta linha representa a correção eletromagnética de polarização do vácuo. Os termos $\vec{S}_i$ representam os momentos magnéticos tridimensionais unitários; $\hat{e}_{ij}$ são os vetores unitários na direção do sítio i para o sítio j e r_{ij} representa a distância entre os referidos sítios. As quantidades ω e $\tilde{\omega}$ podem ser consideradas constantes de acoplamento para o termo de troca e de interação dipolo-dipolo magnético respectivamente. O parâmetro ξ é a massa do bóson escalar e m é a massa do elétron; α é a constante de estrutura fina.

Nós definimos a aplicação do campo magnético externo de maneira ortogonal ao plano da estrutura. A energia e o campo magnético aplicado são expressas em unidades da constante de acoplamento J . A temperatura é expressa em unidades de J/k_b ,

4. Modelagem computacional do grafeno

onde J é a magnitude da constante de acoplamento e k_b é a constante de Boltzmann.

Nós obtivemos a susceptibilidade magnética χ (neste caso projetada sobre o eixo OZ) utilizando o método Monte Carlo conforme a expressão

$$\chi = \frac{1}{k_b T N} (\langle m_z^2 \rangle - \langle m_z \rangle^2), \quad (4.2.2)$$

onde N é o número de spins do sistema e $\langle m_z \rangle$ é a magnetização média por spin na direção z . O calor específico C é obtido através da relação de flutuações de energia

$$C = \frac{1}{k_b T^2 N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (4.2.3)$$

onde $\langle E \rangle$ é a energia média por spin. Para o cálculo do calor específicos utilizamos $B = 0$.

4.2.2. Resultados e discussões

Após a apresentação geral do modelo do hamiltoniano que adotamos em nossas investigações, iremos apresentar agora o resultado das simulações realizadas e seus correspondentes gráficos das propriedades físicas que estamos interessados, sendo elas a magnetização (subseção 4.2.2), a susceptibilidade magnética (subseção 4.2.2) e o calor específico (subseção 4.2.2).

Devido ao grande número de gráficos utilizados, decidimos realizar os comentários logo após cada gráfico e as discussões gerais na seção 4.2.3.

Magnetização

Aqui exibimos os resultados dos cálculos da magnetização em termos do campo magnético aplicado para diferentes valores de ξ .

4. Modelagem computacional do grafeno

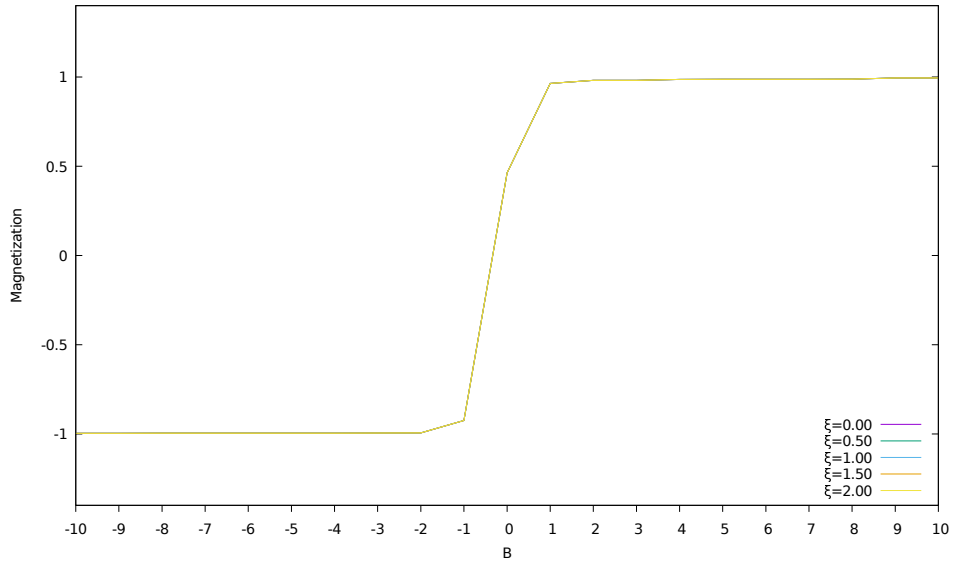


Figura 4.10.: Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.

Neste gráfico, calculamos a magnetização considerando apenas a interação de Heisenberg. Note que como não há troca da partícula de Kekulé, vemos apenas uma curva de magnetização. Há magnetização completa do sistema para valores do campo externo de aproximadamente ± 2 , o que significa que todos os spins estão alinhados na mesma direção do campo. Há uma magnetização positiva de 0,46 na ausência do campo externo e magnetização nula para um campo no valor de $-0,3$.

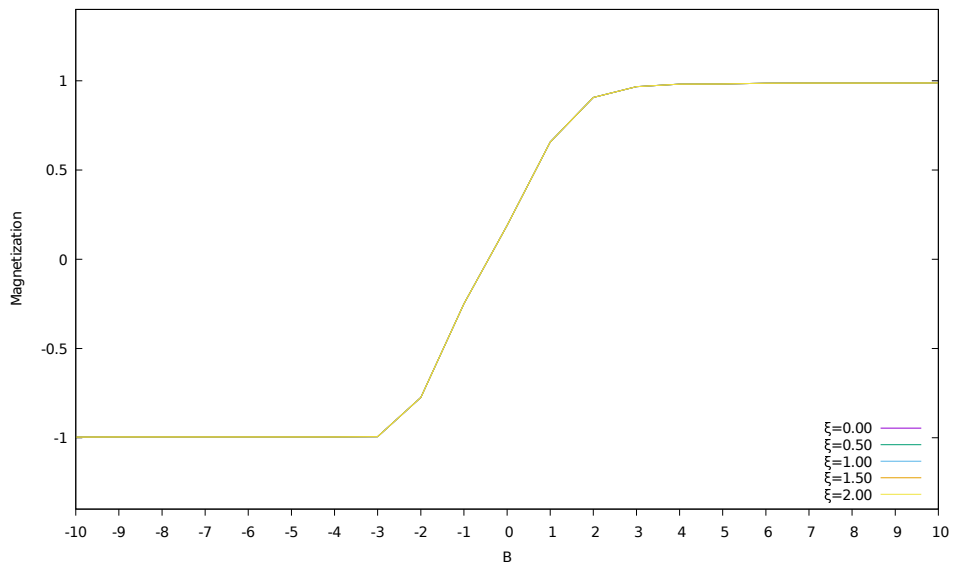


Figura 4.11.: Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com termo de dipolo incluso.

4. Modelagem computacional do grafeno

Quando incluímos a interação dipolar, vemos que a magnetização completa do sistema ocorre para valores do campo de -3 e 4 . Na ausência do campo externo, a magnetização é $0,19$ e não há magnetização para o valor do campo de $-0,5$.

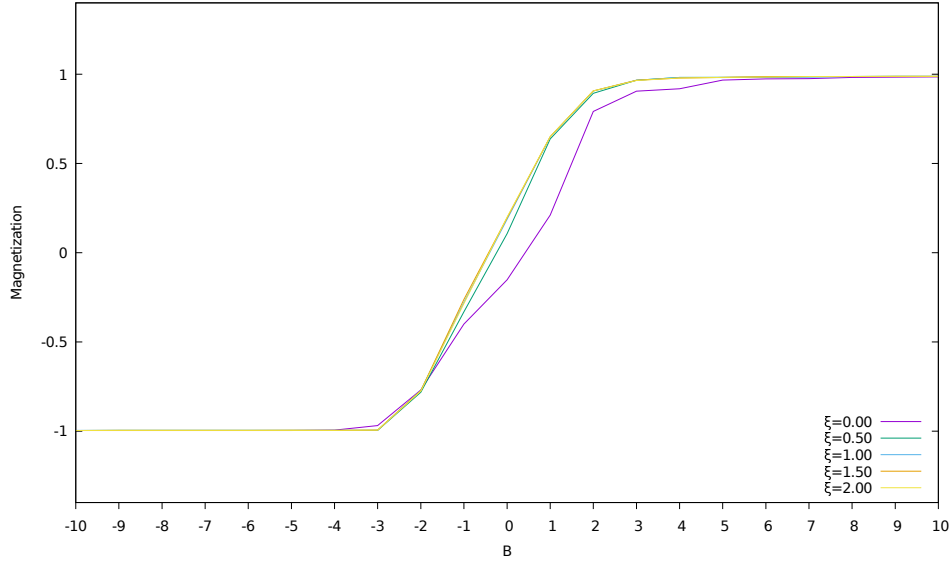


Figura 4.12.: Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com primeiro termo de Kekulé incluso.

Quando incluímos o primeiro termo da interação de Kekulé, claramente vemos um comportamento distinto da curva de magnetização para os diferentes valores de massa do bóson de Kekulé. Para os valores mais elevados de ξ , o padrão da curva de magnetização assemelha-se ao da figura 4.11. Chamamos a atenção para a curva de magnetização para $\xi = 0$. Ela possui uma magnetização de $-0,25$ na ausência do campo externo e magnetização nula para valor do campo de $0,4$. Para o próximo valor mais alto calculado, $\xi = 0,5$, vemos um comportamento muito similar aos valores de ξ mais elevados.

4.11.

4. Modelagem computacional do grafeno

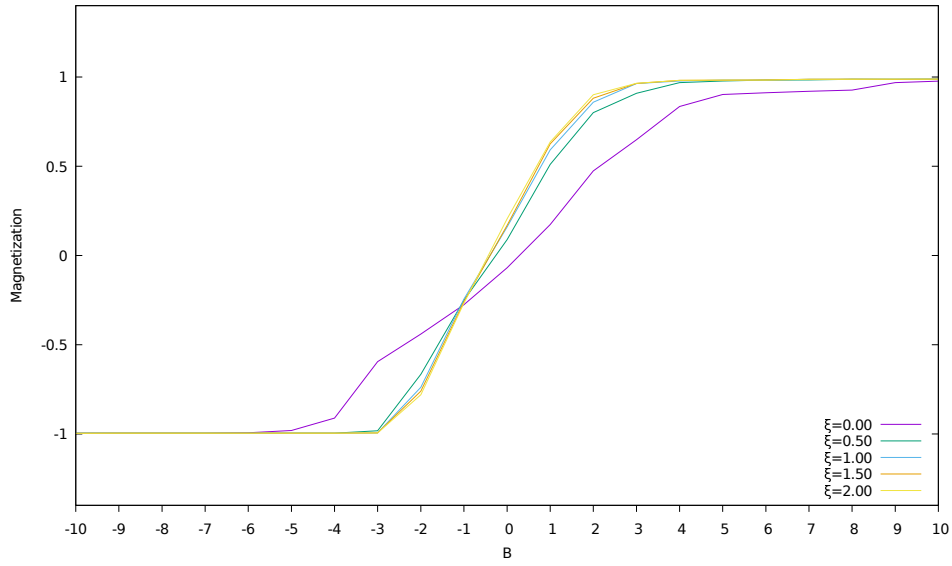


Figura 4.13.: Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.

Neste cálculo, incluímos todos os termos de interação anteriores e mais o segundo termo de Kekulé. A linha $\xi = 0$ mostra que, para uma partícula de Kekulé de massa nula, o material torna-se muito menos sensível ao campo magnético externo. Vemos uma distinção mais clara entre as curvas com valores de ξ mais elevados, mas elas mantêm o mesmo comportamento dos cálculos anteriores. Para que o sistema fique completamente magnetizado para $\xi = 0$, precisamos aplicar um campo duas vezes mais intenso do que o utilizado para valores mais elevados de ξ em ambos os sentidos.

4. Modelagem computacional do grafeno

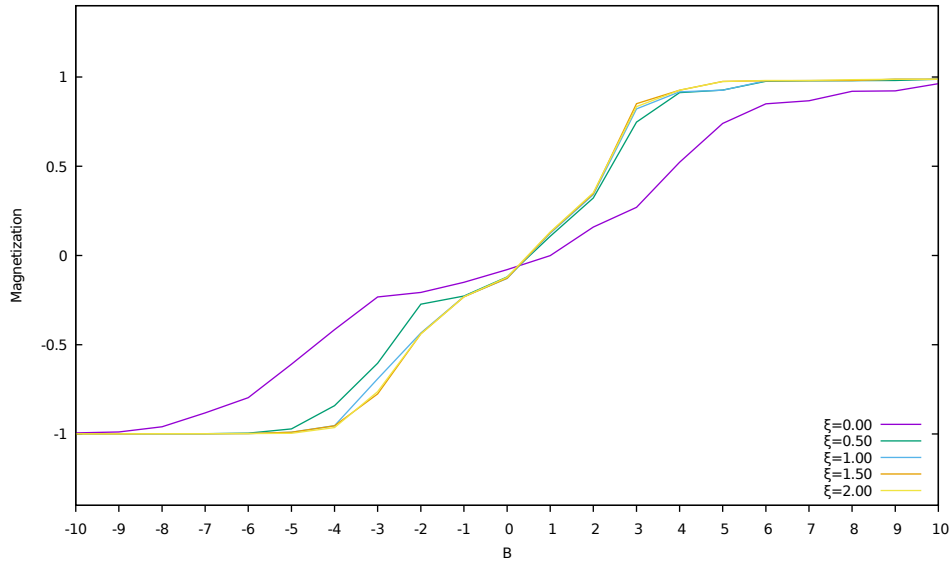


Figura 4.14.: Gráficos da magnetização em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.

Neste cálculo, incluímos o termo de correção de auto-interação aos cálculos anteriores. A influência desta interação se dá claramente principalmente na sensibilidade do sistema ao campo externo para atingir a magnetização completa. Todas as curvas precisam de um campo cerca de duas vezes mais intenso para atingirem a magnetização completa do que no cálculo anterior da figura 4.13. Além disso, todas as curvas mostram uma magnetização negativa na ausência de campos externos de $-0,12$ para $\xi \neq 0$ e -0.08 para $\xi = 0$.

Susceptibilidade Magnética

Aqui apresentamos os resultados dos cálculos da susceptibilidade magnética em termos do campo magnético aplicado para diferentes valores de ξ .

4. Modelagem computacional do grafeno

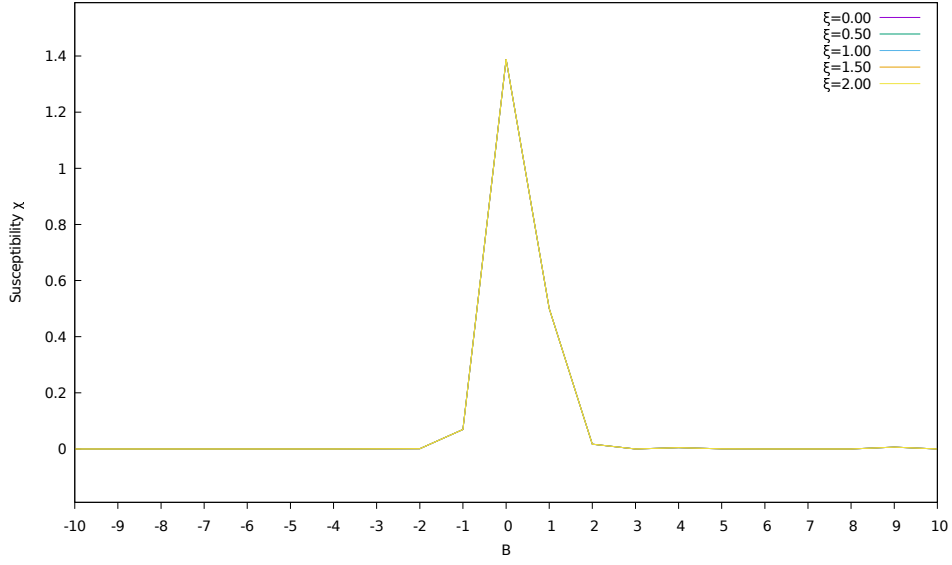


Figura 4.15.: Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.

Podemos ver que a maior susceptibilidade magnética se dá para o valor de $B = 0$, com uma pequena assimetria em relação a valores positivos e negativos do campo externo, mas desaparece rapidamente para valores do campo $|B| > 2$

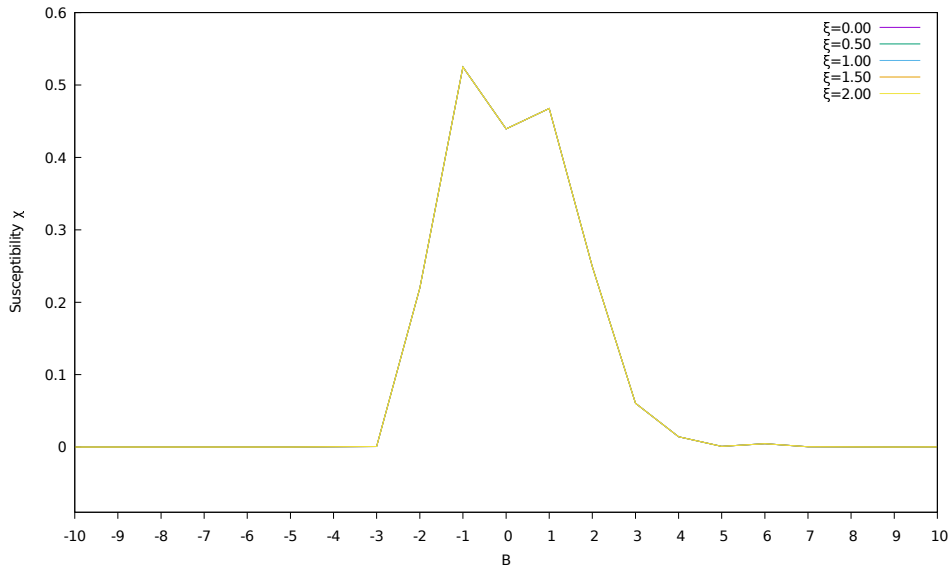


Figura 4.16.: Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com termo de dipolo incluso.

Quando incluímos o termo de interação dipolar, o resultado mostra agora 2 picos para a susceptibilidade magnética, sendo mais alto para campos negativos. Além disso, a intensidade da susceptibilidade fica 3 vezes menor em comparação com a figura 4.15.

4. Modelagem computacional do grafeno

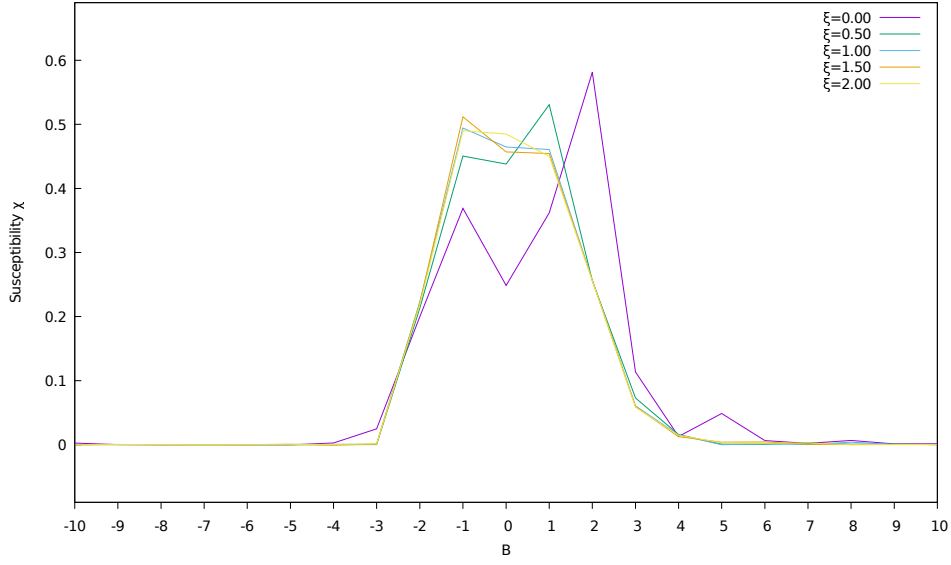


Figura 4.17.: Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com primeiro termo de Kekulé incluso.

Aqui incluímos o primeiro termo de interação de Kekulé aos cálculos anteriores. Podemos ver claramente um padrão de assimetria dos picos de susceptibilidade para valores positivos e negativos do campo, sendo diferente para todos os valores de ξ . Para os valores inferiores de massa $\xi = 0$ e $\xi = 0.5$, vemos que o sistema responde de maneira mais intensa a campos positivos do que negativos, mas esta sensibilidade acompanha a condição de aplicação de campos mais intensos no sentido positivo do que no negativo. Os picos ocorrem para valores de $B = 2.1$ e $B = -1.0$ para $\xi = 0$. Também vemos um terceiro pico de menor intensidade em $B = 5$ para um bóson de massa nula.

Para valores maiores de massa $\xi = 1.0$ e $\xi = 1.5$, vemos que o padrão se inverte em relação às massas menores. O menor pico de susceptibilidade magnética ocorre nos valores mais altos de ξ , enquanto para $\xi = 2.0$ vemos apenas um pico difuso em $B = -1$ que decresce rapidamente para $B > 1.0$.

4. Modelagem computacional do grafeno

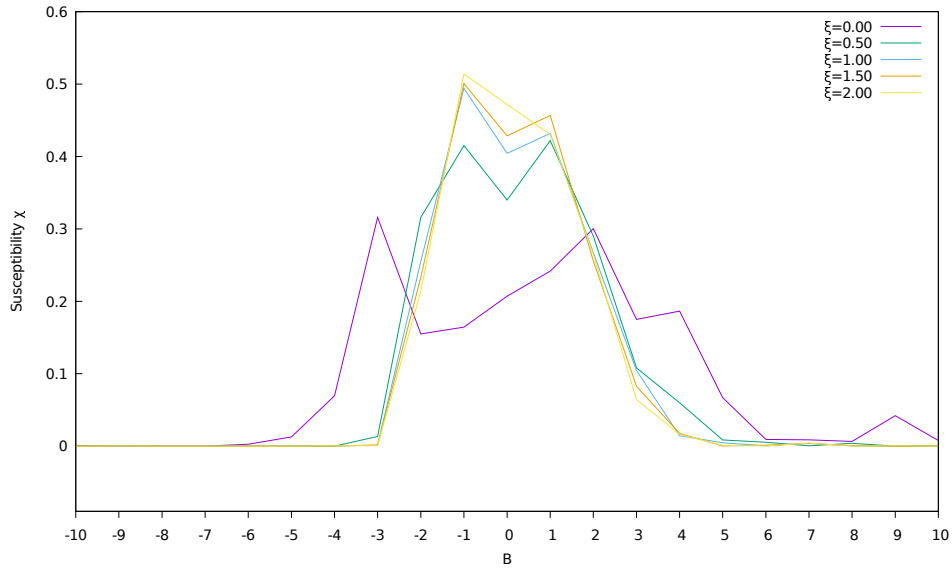


Figura 4.18.: Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.

Aqui incluímos o segundo termo da interação de Kekulé aos cálculos anteriores. Agora as menores susceptibilidades encontram-se nos menores valores de ξ , um comportamento oposto do obtido na figura 4.17 com uma prevalência na região negativa do campo externo. Novamente, vemos para o valor de $\xi = 2.0$ o que parece ser apenas um único pico, em contraste com os 2 picos vistos em todos os outros valores de ξ e o que parece ser até 3 picos para $\xi = 0$.

4. Modelagem computacional do grafeno

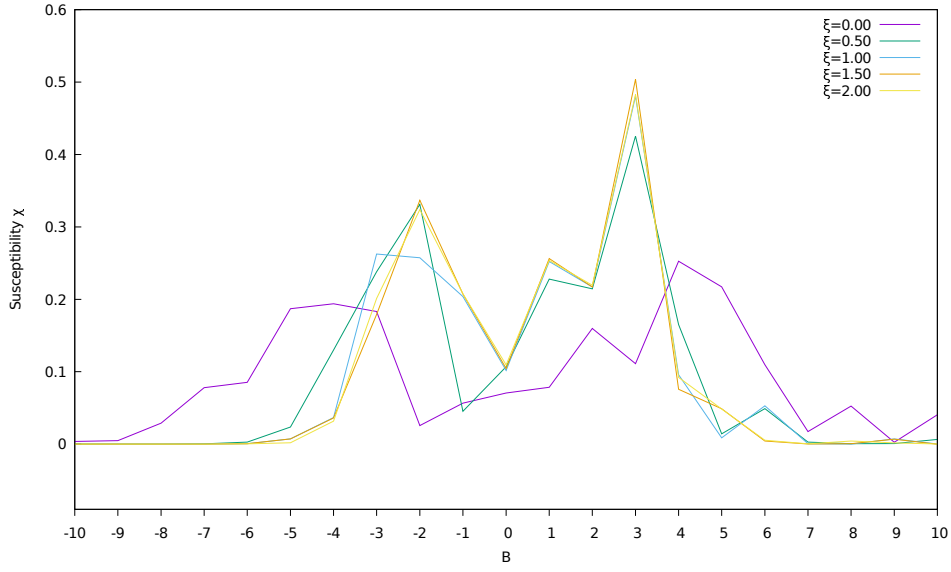


Figura 4.19.: Gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.

Neste cálculo, incluímos a correção de polarização do vácuo aos cálculos anteriores. Novamente, vemos uma mudança no padrão dos picos, agora prevalecendo na região de valores positivos do campo, de maneira oposta ao visto na figura 4.18. Gostaríamos de chamar atenção para o fato de que com a inclusão do termo de loop, a curva para $\xi = 2.0$ tornou-se muito similar à curva para $\xi = 1.5$, exibindo 2 picos distintos.

Além disso, gostaríamos de salientar que na figura 4.18, vemos que para $\xi \neq 0$ os picos ocorrem para valores muito baixos do campo externo, cerca de ± 1 . Na figura 4.19, ambos os picos ocorrem para valores muito maiores do campo externo $B = -2$ e $B = 3$.

Calor específico

Nesta seção, apresentamos os resultados dos cálculos para o calor específico para todos os valores de ξ .

4. Modelagem computacional do grafeno

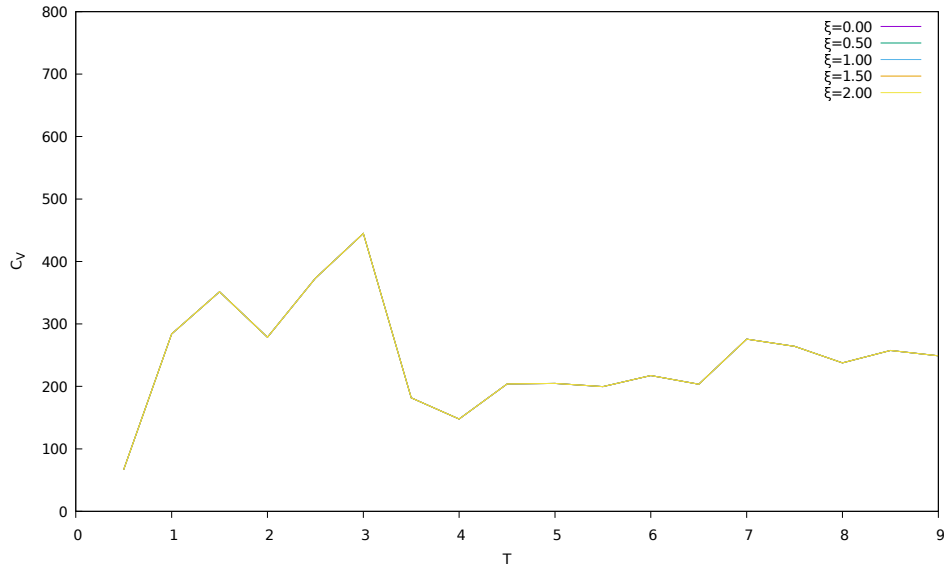


Figura 4.20.: Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ apenas com termo de Heisenberg.

Vemos aqui os resultados para o calor específico calculado apenas com o termo de interação de Heisenberg. Podemos identificar duas regiões de comportamentos diferentes. Vemos um domínio de altos valores de calor específico, possivelmente com dois picos, na região de temperatura de 0 até 4. A partir deste valor, vemos um outro domínio com valores menores de calor específico mas com uma tendência crescente contínua com a temperatura.

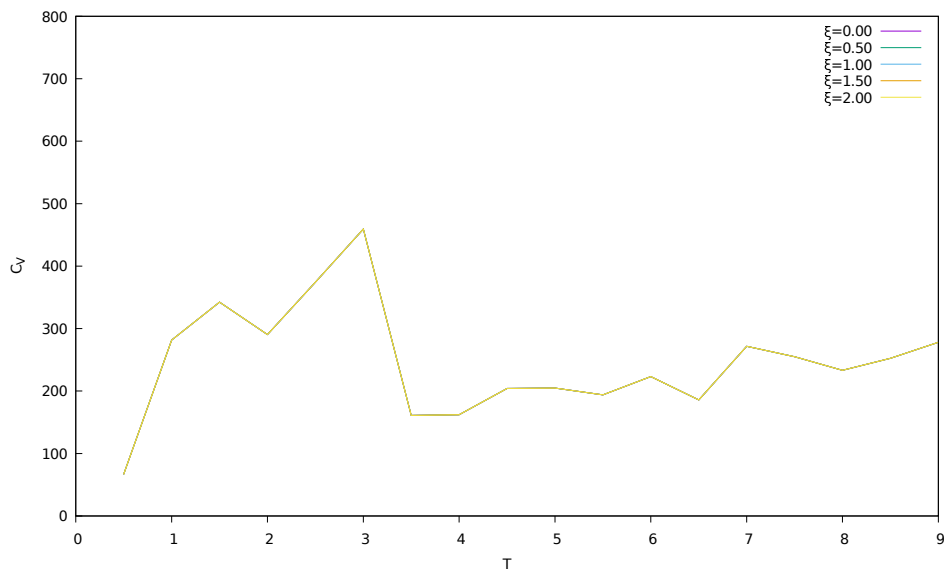


Figura 4.21.: Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o termo de dipolo incluso.

4. Modelagem computacional do grafeno

Na figura 4.21, incluímos o termo de interação dipolar. Vemos apenas pequenas diferenças em relação à figura 4.20, praticamente imperceptíveis, que podem ser atribuídas ao processo de geração de números aleatórios do método de Monte Carlo.

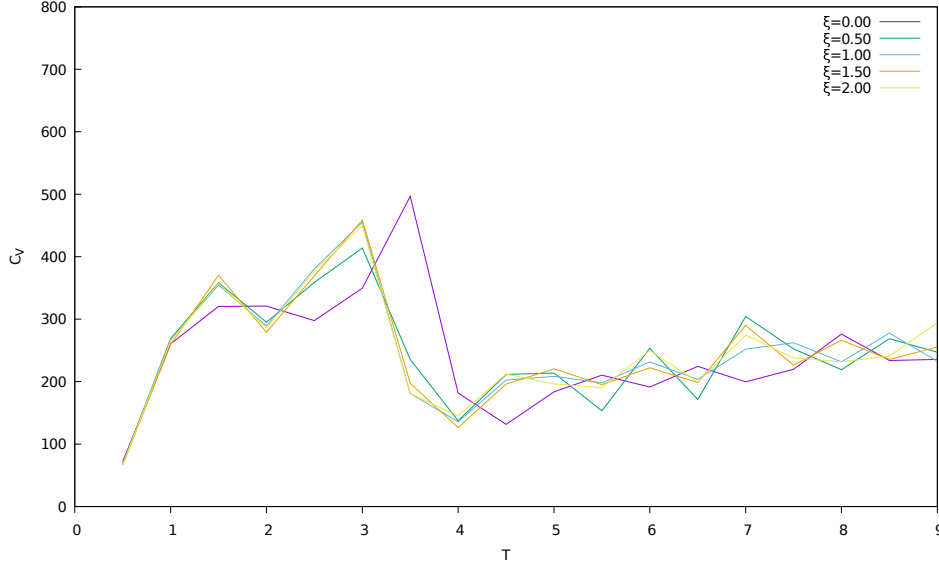


Figura 4.22.: Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o primeiro termo de Kekulé incluso.

Neste cálculo, incluímos o primeiro termo de Kekulé aos cálculos anteriores. Agora é possível ver um comportamento diferente em comparação com as figuras 4.20 e 4.21. A curva para $\xi = 0$ encontra-se transladada para a direita em relação às outras linhas com $\xi \neq 0$. Além disso, para $\xi = 0$ vemos um segundo pico bem distinto no calor específico em relação ao primeiro pico, enquanto para $\xi \neq 0$ temos o que parecem ser dois picos na região $T = [0; 4]$. Para todas as linhas, temos a mesma região de calor específico crescente para $T > 4$, agora com oscilações mais intensas.

4. Modelagem computacional do grafeno

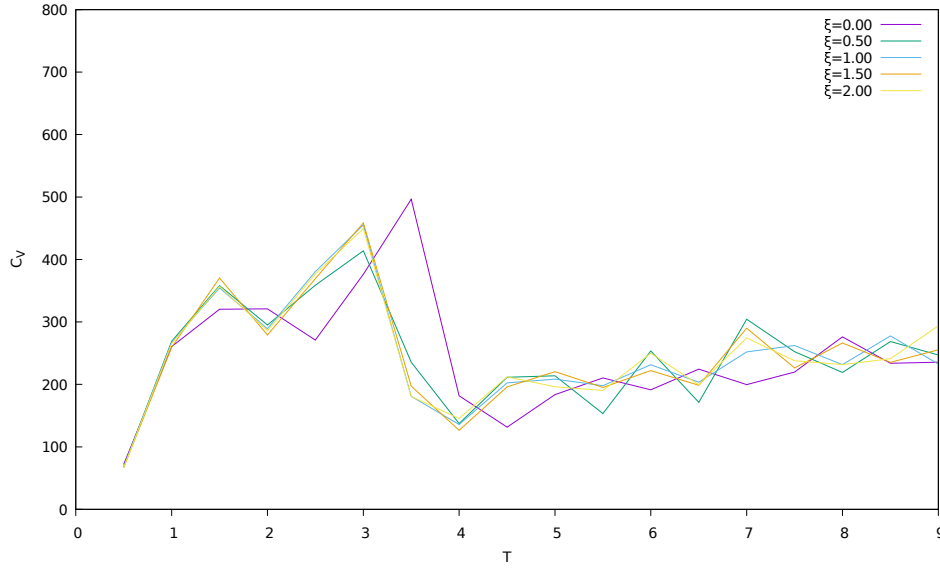


Figura 4.23.: Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com o segundo termo de Kekulé incluso.

Neste cálculo, incluímos o segundo termo de Kekulé aos cálculos anteriores. Vemos apenas poucas diferenças em relação ao cálculo anterior da figura 4.22 e assumimos que eles são consistentes com flutuações inerentes ao método computacional.

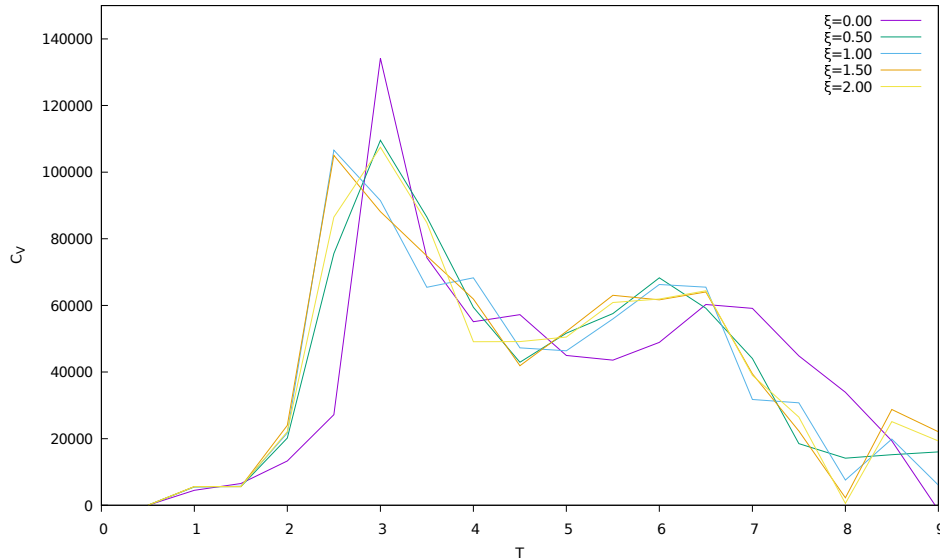


Figura 4.24.: Gráficos do calor específico em função do campo aplicado para todos os valores de ξ , com a correção de polarização do vácuo inclusa.

Na figura 4.24, incluímos o termo de correção de loop aos cálculos anteriores. Este termo possui grande influência no comportamento do calor específico. Vemos agora apenas um pico bem distinto na região de $T = [0; 4]$, que cresce exponencialmente

4. Modelagem computacional do grafeno

a partir de valores menores de T . Na região de $T > 4$, vemos apenas uma elevação na curva, que então apresenta um padrão decrescente. Isto contrasta com o padrão crescente nesta mesma região visto nos cálculos anteriores.

Gostaríamos de ressaltar a mudança na escala vertical da figura 4.24. Ela mostra que os valores do calor específico são 233 vezes maiores que nos cálculos anteriores, indicando uma forte influência do termo de auto-interação ao calor específico.

Isto vai ao encontro da referência [41], que prevê um calor específico para baixas temperaturas proporcional à $C_v \propto T^2/|\ln T^2|$ com correções de segunda ordem de auto-interação deste mesmo tipo.

4.2.3. Discussão e considerações

Mostramos que nosso método para obtenção de potenciais de interação a partir da teoria quântica de campos e usá-los para simular sistemas físicos produz resultados que podem ser comparados com dados experimentais ou outros métodos teóricos e analíticos. Além disso, a ideia que exploramos de que a curvatura da superfície do grafeno pode ser modelada por uma partícula escalar massiva, que chamamos de bóson de Kekulé, mostrou produzir comportamentos diferentes nas propriedades calculadas que podem ser procurados em experimentos.

Na seção 4.2.2, mostramos que a massa da partícula de Kekulé influencia a interação com o campo magnético externo. Vimos em todos os cálculos que quanto maior a massa do bóson de Kekulé, mais intensa é a interação com o campo externo, dadas todas as possíveis configurações. Como um valor alto da massa deste bóson está relacionado com a curvatura do plano do grafeno e também com o alcance desta interação, concluímos que curvaturas mais altas ou defeitos na planaridade da rede no grafeno tornam o material mais suscetível à influência de campos magnéticos externos nas proximidades da região de alta curvatura.

Vimos também que há aparentemente um limite para o valor de ξ , ou em outras palavras, um limite para a curvatura. Vimos nas figuras 4.12, 4.13 e 4.14 que para valores de $\xi \geq 1.5$, a diferença no gráfico de magnetização é praticamente inexistente entre as curvas, indicando que ao aumentar ainda mais a curvatura (ou seja, aumentar a massa ξ), não iríamos observar mudanças adicionais na interação com o campo externo.

4. Modelagem computacional do grafeno

Em relação às contribuições dos termos individuais calculados, concluímos que a maior contribuição para a magnetização do sistema vem da interação dipolo-dipolo, além da massa ξ . Quando este termo foi introduzido nos cálculos (fig. 4.11 e 4.13), os spins em cada sítio interagem entre si de maneira que o campo externo necessário para promover um alinhamento completo dos spins da rede é 50% maior do que na ausência desta interação. Como o campo externo interage com cada sítio da rede individualmente, a interação dipolar entre os sítios de maneira que o estado energeticamente favorável é com os spins perpendiculares um aos outros, e não paralelos (no caso do alinhamento com o campo externo). Portanto, quando esta interação foi ligada em nossas simulações, vemos imediatamente um aumento no campo externo necessário para alinhar todos os spins paralelamente uns aos outros e ao campo externo.

Em relação ao tema muito debatido sobre as propriedades magnéticas intrínsecas do grafeno (para detalhes, ver as referências [29, 87–91]), nossos cálculos propõem cenários diferentes e conflitantes. Mostramos que em nosso modelos, os cálculos sem a partícula de Kekulé resultaram em um grafeno levemente magnético, com um alinhamento de um pequeno número de spins na ausência de um campo externo (fig. 4.10 e 4.11). Isto também pode também ser um indicador de histerese no material, já que no processo computacional nós fizemos uma varredura unidirecional a partir de valores maiores do campo externo para valores menores. Quando os termos de Kekulé foram incluídos nos cálculos (fig. 4.12 e 4.13), também houve ordenamento dos estados de spin, mas a direção manteve dependência com o valor da massa da partícula de Kekulé. Para os valores menores de ξ , houve uma orientação média na direção negativa e para os valores maiores houve orientação média na direção positiva. Não pudemos investigar para qual valor de ξ esta mudança preferencialmente ocorre, nem para qual valor há magnetização nula, devido a limitações na implementação do nosso algoritmo. Quando incluímos o termo de correção de loop (fig. 4.14), nossos resultados mostraram apenas orientação negativa dos spins para todos os valores de ξ , o que significa que estes termos de segunda ordem podem ter uma grande influência no ordenamento de spins na rede.

Nosso método considerou uma variedade de possíveis cenários e possíveis respostas em cada caso analisado, mas uma limitação da implementação do nosso código é que

4. Modelagem computacional do grafeno

necessitamos de dados experimentais para os parâmetros de ajuste utilizados, portanto tornando impossível apresentar respostas conclusivas com um alto grau de precisão em tópicos onde há atualmente debate na literatura ou falta de dados experimentais. Um fator positivo é que nosso modelo é flexível o suficiente para contemplar os possíveis cenários em debate e fornecer pistas para investigações futuras, considerando que novos termos de interação podem ser facilmente incluídos, “ligados” ou “desligados” para verificar a viabilidade de alguma descrição física em análise.

Nos cálculos da susceptibilidade magnética, mostramos que cada termo adicionado ao cálculo (dipolo-dipolo magnético, Kekulé e loop) altera a susceptibilidade ao campo externo, corroborando com os nossos resultados para a magnetização. Vemos uma assimetria na susceptibilidade em relação ao sentido do campo aplicado em relação a valores positivos e valores negativos do campo, bem como na intensidade. Isto parece indicar uma direção preferencial de alinhamento dos spins na presença de um campo externo. Esta direção preferencial depende diretamente da massa da partícula de Kekulé, quando este termo encontra-se presente nos cálculos, e também nas interações de acoplamento dipolar.

Como mostramos na fig. 4.15, o maior valor da susceptibilidade ocorre para campos pouco intensos, tanto no sentido positivo quanto negativo de aplicação. Conforme aumentamos a intensidade do campo magnético aplicado, a susceptibilidade rapidamente decresce para valores negativos do campo aplicado e decresce cerca de 50% mais devagar para valores positivos do campo antes de atingir o zero. Quando as interações dipolo-dipolo são incluídas nos cálculos na fig. 4.16, ainda vemos uma taxa de decrescimento da susceptibilidade menor para campos positivos do que para campos negativos. Mas há uma diferença fundamental em relação ao cálculo realizado apenas com o termo de Heisenberg: a susceptibilidade aumenta para campos pouco intensos e diminui para campos mais intensos. Parece haver uma tendência dos spins responderem mais intensamente a campos magnéticos fracos enquanto os spins começam a alinhar-se ao campo. Esta resposta rapidamente atinge um limite quando a amostra atinge certo nível de magnetização (spins ficam mais paralelos uns aos outros) devido à interação dipolar, que se opõe a este alinhamento, e para aumentar ainda mais a magnetização deve-se aplicar um campo muito mais intenso neste caso.

4. Modelagem computacional do grafeno

Este padrão permanece quando os termos de Kekulé são adicionados na figura 4.17. Quando o termo de interação Kekulé-dipolo foi adicionado na figura 4.18, este padrão permanece extremamente dependente do valor de ξ . Para $\xi = 0$, para campos fracos vemos novamente uma direção preferencial no sentido de campos positivos. A susceptibilidade aumenta com a intensidade de aplicação de campos positivos, mas diminui para campos negativos. Os spins alinham-se mais rapidamente na direção positiva do que na negativa. Para $|B| = 2$, vemos um ponto de mudança. Para valores negativos do campo, os spins alinham-se mais rapidamente, e para valores positivos do campo, a taxa de alinhamento de spins atinge um valor limite. Quando aumentamos o valor de ξ , isto muda rapidamente, e a curva de susceptibilidade torna-se mais simétrica em relação ao sentido do campo aplicado para valores pouco intensos do campo. Para $\xi = 2$, vemos outro surgimento de uma assimetria. Para campos fracos, a taxa de alinhamento de spins aumenta para campos negativos e diminui para campos positivos, nunca aumentando para estes campos positivos e atingindo um pico para campos negativos. Entretanto, ainda decresce de maneira mais lenta para campos positivos do que para negativos. Concluímos que a curvatura do grafeno, ou o grau de irregularidades na estrutura, possui forte influência na susceptibilidade magnética da amostra.

Quando incluímos também o termo de segunda ordem de auto-interação na fig. 4.19, ainda vemos uma assimetria altamente dependente no valor de ξ similar à fig. 4.18, mas conforme aumentamos o valor de ξ , o padrão da susceptibilidade magnética tende a manter a simetria para campos fracos, de maneira muito similar à $\xi = 1.5$ e $\xi = 2.0$. Ainda vemos uma preferência por campos positivos para altos valores de $|B|$, mas isto não é visto para baixos valores de $|B|$. Isto mostra que os efeitos da correção da polarização do vácuo podem ser significantes nas características desta propriedade. Admitimos aqui uma limitação em nossa análise: não podemos ter certeza se superestimamos ou subestimamos o termo de auto-interação. O valor do parâmetro de ajuste utilizado foi obtido por considerações de otimização de energia e não é único, já que nossos cálculos não foram *ab initio*. Os parâmetros utilizados para os outros termos foram escolhidos de uma faixa de valores muito limitada, obtida utilizando as mesmas considerações, todos exibindo as mesmas características. Portanto, não apresentam a mesma preocupação que o termo de loop neste quesito.

4. Modelagem computacional do grafeno

Para o cálculo do calor específico, mostramos que a interação dipolo-dipolo magnético não influencia esta propriedade, como pode ser visto na fig. 4.21 e fig. 4.23. isto significa que a interação entre spins da rede, tanto via troca de fótons quanto troca de bósons de Kekulé, não influenciam como a rede armazena energia térmica. Em outras palavras, as interações magnéticas não influenciam na vibração da rede devido a flutuações térmicas.

Vimos nas figuras 4.20 e 4.22 que o calor específico é fracamente dependente no valor de ξ . Vemos uma distinção clara de duas regiões nos cálculos: uma com 2 picos elevados, que ocorre até um valor aproximado de $T = 4$, e outro onde o calor específico aumenta continuamente com pequenas flutuações para $T > 4$. Como vimos na fig. 4.22, o valor de ξ desloca estes padrões horizontalmente. Conforme aumentamos os valores de ξ , as curvas deslocam-se para a esquerda, mas vemos que este deslocamento rapidamente alcança um limite. Para $\xi \geq 0.5$, há apenas mudanças muito pequenas nas intensidades dos picos, mas não há deslocamento lateral para valores de T . Também vemos que para $\xi > 0$, há uma maior resolução do primeiro pico em relação a $\xi = 0$. Não investigamos, usando uma maior resolução de ξ nos cálculos, para determinar precisamente para qual valor de ξ isto ocorre. Entretanto, vemos que a influência de ξ alcança um limite rapidamente na capacidade de armazenar energia térmica, sendo mais alta para valores menores de ξ e valores baixos de temperatura.

O que mostrou-se surpreendente em nossos cálculos foi a importância das correções de loop na determinação do calor específico do grafeno, como visto na fig. 4.24. Vemos um crescimento exponencial no C_v para valores pequenos de T , que não estava presente na ausência deste termo de interação. Este resultado é consistente com os trabalhos de Pei-Song et al. [41]. Neste trabalho, os autores preveem que o calor específico deva ter uma dependência da temperatura proporcional a $C_v \propto T^2/|\ln T^2|$, que conseguimos reproduzir em nosso modelo computacional. Também mostramos que há um segundo, menor e mais difuso pico de calor específico para valores de T cerca de duas vezes maior do que o primeiro pico. Ambos possuem valores significativamente maiores do que os mostrados nas figuras 4.20 e 4.22. Também vimos que a região de crescimento constante do calor específico não encontra-se na figura 4.24, mas isto pode ser devido à diferença na escala dos cálculos anteriores. Pretendemos

4. Modelagem computacional do grafeno

aumentar a escala de temperatura em trabalhos futuros. Vemos que o valor de ξ neste caso produz o mesmo padrão de deslocamento lateral das curvas visto na figura 4.22.

O trabalho de Pei-Song et al. [41] mencionado também prevê uma dependência da susceptibilidade magnética para baixos valores de temperatura da forma $C_v \propto T/|\ln T^2|$. Nosso algoritmo não prevê este tipo de cálculo e não pudemos testar a previsão dos autores do trabalho citado, embora calculamos esta propriedade em relação ao campo magnético externo. Devemos ser capazes de aprimorar o algoritmo e implementar a possibilidade deste cálculo em futuros trabalhos.

A propriedade do calor específico mostrou ter pouca interferência da interação dipolo-dipolo magnético. Ambos com e sem os termos de Kekulé, a inclusão da interação tipo dipolo-dipolo não alterou nenhuma característica desta propriedade. Apenas a interação de Kekulé mostrou alguma influência no calor específico, principalmente considerando os valores calculados para a massa do escalar de Kekulé. A menos deste caso, não altera as características desta propriedade em relação à interação de Heisenberg. O parâmetro que mais influencia o calor específico é a correção de polarização do vácuo. Ele aumenta o valor do pico cerca de 233 vezes, evidencia um pico principal (em contraste com dois picos na região $T = [0; 4]$) e mostra um segundo pico mais difuso na região $T > 4$ com um valor decrescente do calor específico para $T > 7$. O pico elevado obtido na região de $T = [0; 4]$ corrobora com os resultados obtidos por [41] utilizando outros métodos analíticos de avaliação para o mesmo sistema.

5. Considerações finais e perspectivas futuras

Neste capítulo final, procuramos fazer uma auto-análise do trabalho até aqui apresentado, e também para onde esperamos que este trabalho evoluirá e continuará sendo desenvolvido.

Em termos gerais, esta tese buscou amalgamar elementos da Teoria Quântica de Campos, da Física da Matéria Condensada e da Física Computacional. Na primeira parte da tese, o capítulo 2, discutimos aspectos eletrodinâmicos do grafeno. Com isto, estabelecemos o arcabouço teórico do sistema físico que viríamos a modelar. Estabelecemos que a eletrodinâmica do grafeno é descrita pela equação de Dirac, e não pela mecânica quântica não-relativística de Schrödinger. Na sequência, mostramos como uma espécie de inomogeneidade na estrutura cristalina, a chamada textura de Kekulé, modifica a eletrodinâmica do material. Na verdade, a textura de Kekulé introduz uma variação na posição dos átomos de carbono em qualquer direção espacial, não apenas ao longo da ligação entre os átomos vizinhos. Portanto, ela pode gerar uma estrutura complexa de desvios da planaridade do material. Mostramos que estas tensões produzem um acoplamento do campo espinorial com um campo escalar. Além disso, produzem também uma mistura entre vales, ou pseudospins distintos (sub-redes distintas).

Ao longo do capítulo, sugerimos várias referências sobre defeitos estruturais no grafeno e a miríade de diferentes fenômenos que eles promovem. Alguns promovem o acoplamento do campo espinorial com campos de gauge efetivos, produzindo campos magnéticos no grafeno, ou até campos elétricos. Como perspectiva futura de trabalho, contemplamos modelar o acoplamento com campos de gauge e escalares advindos de outros defeitos estruturais, com características distintas, para estudar o comportamento de características física do grafeno sob uma óptica mais abrangente e dinâmica.

5. Considerações finais e perspectivas futuras

No capítulo 3, desenvolvemos a técnica para obtenção de potenciais de interação não-relativísticos a partir de uma teoria de campos relativísticos. Nos mantivemos dentro da descrição do acoplamento de espinores com campos escalares e campos vetoriais pois compreendiam o universo de possibilidades que pretendíamos simular. Mantivemos termos de ordens superiores pois estes mostram a influência do spin nas interações, o que não acontece se nos restringirmos apenas a termos de primeira ordem. Os apêndices A e B trazem muitos cálculos auxiliares para o capítulo que foram mantidos como referências.

Outros trabalhos de membros do nosso grupo também foram sugeridos [38, 39]. Nestes trabalhos, utilizamos a mesma técnica para obter potenciais de interação mediados por outros campos, como campo de Proca, Cremer-Scherk-Kalb-Ramond, mixing de campos tensoriais e vetoriais e campos com massa topológica.

No capítulo 4, aplicamos a técnica apresentada no capítulo 3 no contexto do grafeno, baseado na justificativa da textura de Kekulé estar associada com campos escalares. Neste capítulo apresentamos os trabalhos originais produzidos como consequência deste processo de doutoramento e publicados ou em processo de publicação. Explicamos a metodologia utilizada, embora o algoritmo em si não tenha sido apresentado. Entretanto, o algoritmo encontra-se disponível em <https://gitlab.com/ricardomartins> para edição colaborativa sob a licença GPLv2 para membros autorizados.

A seção 4.1 apresenta o primeiro artigo já publicado. O algoritmo desenvolvido encontrava-se em seu primeiro estágio. As dificuldades encontradas primeiramente foram no intuito de encontrar um sistema adequado para as simulações, levando em conta o tempo computacional. Nesta etapa, calculamos a susceptibilidade magnética, magnetização e o calor específico com termos de Heisenberg, dipolo-dipolo e seus equivalentes escalares referentes à partícula de Kekulé. Nosso modelo prevê propriedades diamagnéticas da estrutura, o que está de acordo com modelos teóricos [16]. Entretanto, vemos um perfil dinâmico desta propriedade, que varia conforme a inhomogeneidade da estrutura cristalina (representada pela massa ξ da partícula de Kekulé).

Reconhecemos que o algoritmo, por não ser um método de primeiros princípios, contém constantes que precisam ser ajustadas com dados experimentais, por métodos

5. Considerações finais e perspectivas futuras

de minimização ou heurísticos. Para cada termo adicionado ao hamiltoniano, é necessário repetir o processo, o que custa mais tempo computacional. Como perspectiva futura, pretendemos aprimorar o algoritmo para melhorar o processo de determinação destas constantes de ajuste.

Nesta versão do algoritmo, não era permitido analisar a variação das propriedades físicas com relação a cada termo de interação. Neste caso, o cálculo fora realizado com o hamiltoniano completo em todas as etapas. Para conseguirmos mais detalhes nos cálculos, variamos os valores de ξ por uma gama maior de possibilidades.

A seção 4.2 traz o segundo artigo elaborado, com uma versão mais avançada do algoritmo. Neste caso, incluímos também termos no potencial devido a polarização do vácuo. Também neste caso, apresentamos os resultados para a susceptibilidade magnética em módulo, entretanto os valores encontrados indicam também diamagnetismo.

Nesta versão do algoritmo, pudemos controlar com flexibilidade cada termo do hamiltoniano, podendo “desligar” e “ligar” termos de interação em cada etapa dos cálculos. Isto nos permitiu uma análise mais apurada da contribuição de cada termo individual. Neste caso, escolhemos variar os valores de ξ por um intervalo mais amplo, mas com menos valores intermediários, e nos concentrar na análise da contribuição de cada termo ao hamiltoniano. Entretanto, este ponto positivo vem acompanhado de um lado negativo, pois tornou-se mais difícil calcular os valores das constantes de ajuste de cada termo, aumentando o tempo computacional e a complexidade dos cálculos. Também encontramos diversos conjuntos de constantes possíveis e tivemos que recorrer à literatura para filtrar aqueles conjuntos que mais aproximavam os resultados aos valores experimentais ou teóricos. Consideramos um sucesso do algoritmo ao conseguir reproduzir os resultados teóricos em [84] para o calor específico com o termo de correção de loop, além de prever o diamagnetismo do material.

Reconhecemos uma limitação do algoritmo em não permitir calcular o valor da susceptibilidade magnética em função da variação da temperatura. Há valores na literatura para esta relação, entretanto esta versão do algoritmo não permite calcular da mesma maneira como é feito para as outras propriedades. Pretendemos incluir esta funcionalidade em uma versão futura do algoritmo.

5. Considerações finais e perspectivas futuras

Outra limitação do algoritmo é que sua incapacidade de calcular propriedades dinâmicas e modificações estruturais em tempo real. Em outras palavras, o tempo não foi incluído como uma variável. Portanto, cálculos de propriedades de transporte, corrugações estruturais, ondulações, efeito Hall, etc. não puderam ser contempladas. Estamos estudando maneiras de aprimorar o algoritmo para incluir estes efeitos de maneira consistente, se possível sem reescrever grandes porções do algoritmo, mas ainda não temos um plano de ação consolidado neste sentido.

Pelo nosso modelo tratar os spins localizados nos sítios contrastar com o caso real de spins não localizados no grafeno, ressaltamos que estes resultados podem ser representativos de um domínio restrito de situações possíveis. Para ampliar o alcance deste modelo, é necessário considerar a dinâmica dos spins no grafeno.

Como continuação deste trabalho, além das possibilidades já elencadas ao longo desta discussão, citamos mais algumas perspectivas futuras:

- cálculo de propriedades ópticas, como polarizabilidade, primeira e segunda hiperpolarizabilidades;
- utilizar diferentes estruturas-base, como bicamadas de grafeno, nanotubos, fullerenos, grafanos e grafinos;
- considerar efeitos de polarização do vácuo na interação eletromagnética, também conhecido como potencial de Uehling em 2 dimensões;
- estudar efeitos de localização dos elétrons;
- espalhamento elétron-fônon;
- espalhamento elétron-elétron e a influência de modos coletivos de excitação, como plásmons, em propriedades físicas do material.

Concluindo, seria oportuno levantar uma crítica final ao nosso e a muitos trabalhos da literatura na área no que concerne a questão da dimensionalidade experimentada pelos férmions da rede (que são realmente confinados a um plano) e a dinâmica dos fótons (que não necessariamente são sujeitos a uma dinâmica confinante ao plano).

5. Considerações finais e perspectivas futuras

Esta discussão está muito ausente da literatura e, para atacá-la de forma objetiva, estamos trabalhando em nosso Grupo uma técnica a que denominamos Restrição Dimensional, que não é o mesmo que Redução Dimensional. A ideia que estamos trabalhando já vem demonstrando expectativas positivas no âmbito da Física dos Supercondutores Topológicos, para os quais a dinâmica fundamental se passa em 5 dimensões mas o material, que é (1+3)-dimensional, percebe as interações como uma projeção holográfica.

Estamos trazendo este mecanismo para uma Física em (1+3) dimensões, considerando que os elétrons da rede são genuinamente confinados ao plano do material, porém os fótons têm sua dinâmica planar como uma restrição dimensional (ao plano do grafeno) a partir de uma dinâmica verdadeiramente tridimensional.

Estas questões estão em andamento e são tópicos constituintes de Tese de Doutorado a ser defendida futuramente em nosso Grupo de Pesquisa [92, 93].

O algoritmo encontra-se disponível em <https://gitlab.com/ricardomartins> para edição colaborativa sob a licença GPLv2 para membros autorizados.

O algoritmo foi escrito na linguagem FORTRAN e compilado com o compilador livre GCC-FORTRAN. Os gráficos foram gerados utilizando o programa GnuPlot. Apenas softwares livres foram utilizados em todas as etapas deste trabalho. Esta tese foi escrita em $\text{\LaTeX}$ através do editor de texto Emacs. A fonte utilizada foi Linux Libertine.

A. Derivadas

- $$\frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \right) = \frac{iq_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \quad (\text{A.0.1})$$

- $$\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} \left(\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \right) = -\frac{q_i q_j e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \quad (\text{A.0.2})$$

- $$\frac{\partial^3}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k} \left(\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \right) = -\frac{iq_i q_j q_k e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \quad (\text{A.0.3})$$

- $$\frac{\partial^4}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k \partial r_l} \left(\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \right) = \frac{q_i q_j q_k q_l e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \quad (\text{A.0.4})$$

B. Integrais

$$\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} = \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \quad (\text{B.0.1})$$

$$\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i = \frac{i}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} (1 + m_0 r) r_i \quad (\text{B.0.2})$$

Apresentamos a demonstração da expressão (B.0.2). Utilizando das equações (A.0.1) e (B.0.1), temos

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \right) \\ &= \frac{1}{4\pi i} \left[\left(\frac{\partial}{\partial r_i} e^{-m_0 r} \right) \frac{1}{r} + e^{-m_0 r} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{1}{r} \right) \right] \\ &= \frac{1}{4\pi i} \left[\frac{-m_0 r_i e^{-m_0 r}}{r^2} + e^{-m_0 r} \left(-\frac{r_i}{r^3} \right) \right] \\ &= \frac{i}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} (1 + m_0 r) r_i \end{aligned}$$

B. Integraais

$$\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j = -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r)] \quad (\text{B.0.3})$$

Apresentamos a demonstração da expressão (B.0.3). Utilizando as equações (A.0.2) e (B.0.1), temos

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j &= -\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} \left(\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial r_j} \left(-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} (1 + m_0 r) r_i \right) \\ &= -\left\{ -\frac{1}{4\pi} \left[(1 + m_0 r) \left(\frac{\partial}{\partial r_j} (e^{-m_0 r}) \frac{r_i}{r^3} + e^{-m_0 r} \frac{\partial r_i}{\partial r_j} \frac{1}{r^3} + e^{-m_0 r} r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{1}{r^3} \right) + \frac{e^{-m_0 r}}{r^3} r_i m_0 \frac{\partial r}{\partial r_j} \right] \right\} \\ &= -\left\{ -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi} \left[(1 + m_0 r) \left(\frac{-m_0 r_j}{r} \frac{r_i}{r^3} + \frac{\delta_{ij}}{r^3} + r_i \left(-\frac{3r_j}{r^5} \right) \right) + \frac{r_i m_0}{r^3} \frac{r_j}{r} \right] \right\} \\ &= -\left\{ -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [(1 + m_0 r)(-m_0 r r_i r_j + r^2 \delta_{ij} - 3r_i r_j) + m_0 r r_i r_j] \right\} \\ &= -\left\{ -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_i r_j (-m_0^2 r^2 - 3m_0 r - 3) + r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r)] \right\} \\ &= -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} [r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r)] \end{aligned}$$

B. Integraes

$$\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j q_k = -\frac{ie^{-m_0 r}}{4\pi r^7} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] - r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \quad (\text{B.0.4})$$

Apresentamos a demonstração da expressão (B.0.4). Utilizando as equações (A.0.3) e (B.0.1), temos

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j q_k &= -\frac{1}{i} \frac{\partial^3}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \\ &= -\frac{1}{i} \frac{\partial^3}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k} \left(\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r} \right) \\ &= -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial r_k} \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r) \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{i} \left\{ \frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{r^5} \frac{\partial}{\partial r_k} e^{-m_0 r} + e^{-m_0 r} \frac{\partial}{\partial r_k} \frac{1}{r^5} \right] \left[r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[(m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left(\frac{\partial}{\partial r_k} (r_i) r_j + r_i \frac{\partial}{\partial r_k} (r_j) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + r_i r_j \left(m_0^2 \frac{\partial}{\partial r_k} r^2 + 3m_0 \frac{\partial}{\partial r_k} r \right) - \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial r_k} r^2 (1 + m_0 r) - r^2 \delta_{ij} m_0 \frac{\partial}{\partial r_k} r \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{i} \left\{ \frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{r^5} \frac{-m_0 r_k e^{-m_0 r}}{r} + e^{-m_0 r} \frac{(-5r_k)}{r^7} \right] \left[r_i r_j (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} (1 + m_0 r) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^5} \left[(m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) (\delta_{ij} r_j + r_i \delta_{jk}) + r_i r_j \left(m_0^2 2r_k + 3m_0 \frac{r_k}{r} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \delta_{ij} 2r_k (1 + m_0 r) - r^2 \delta_{ij} m_0 \frac{r_k}{r} \right] \right\} \end{aligned}$$

B. Integrals

$$= -\frac{1}{i} \left\{ \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^7} \left\{ - (m_0 r + 5) \left[r_i r_j r_k (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) - r^2 \delta_{ij} r_k (1 + m_0 r) \right] \right. \right. \\ \left. \left. + r^2 (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik}) + r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right. \right. \\ \left. \left. - 2r^2 \delta_j r_k (1 + m_0 r) - r^2 m_0 r \delta_{ij} r_k \right\} \right\}$$

$$= -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi i r^7} \left\{ r_i r_j r_k \left[- (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) (m_0 r + 5) + (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right] \right. \\ \left. - r^2 \delta_{ij} r_k \left[- (1 + m_0 r) (m_0 r + 5) + m_0 r + 2(1 + m_0 r) \right] \right. \\ \left. + r^2 (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik}) \right\}$$

$$= -\frac{ie^{-m_0 r}}{4\pi r^7} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] \right. \\ \left. - r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\}$$

B. Integrales

$$\begin{aligned}
 \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j q_k q_l = \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^9} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k r_l \left[(m_0 r + 5)(m_0 r + 7) - m_0 r \right] \right. \right. \\
 - r^2 (m_0 r + 5) \left[r_i (\delta_{jk} r_l + r_j \delta_{kl}) + r_j (r_k \delta_{il} + \delta_{ik} r_l) + r_k (\delta_{ij} r_l + r_i \delta_{jl}) \right] \\
 \left. \left. + r^4 (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{kl} \delta_{ij}) \right] - (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \left[r_i r_j r_k r_l 2(m_0 r + 6) \right. \right. \\
 - r^2 \left[r_i (\delta_{jk} r_l + r_j \delta_{kl}) + r_j (r_k \delta_{il} + \delta_{ik} r_l) + r_k (\delta_{ij} r_l + r_i \delta_{jl}) \right] \left. \right. \\
 \left. \left. + r_i r_j r_k r_l (4m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \quad (B.0.5)
 \end{aligned}$$

Apresentamos a demonstração da expressão (B.0.5). Utilizando as equações (A.0.4) e (B.0.1), temos

$$\begin{aligned}
 \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} q_i q_j q_k q_l &= \frac{\partial^4}{\partial r_i \partial r_j \partial r_k \partial r_l} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\vec{q}^2 + m_0^2} \\
 &= \frac{\partial}{\partial r_l} \left\{ -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^7} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \right\} \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \left\{ \left[\frac{1}{r^7} \frac{\partial}{\partial r_l} e^{-m_0 r} + e^{-m_0 r} \frac{\partial}{\partial r_l} \frac{1}{r^7} \right] \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] - r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{e^{-m_0 r}}{r^7} \left\{ \frac{\partial}{\partial r_l} (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \frac{\partial}{\partial r_l} \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{\partial}{\partial r_l} (r_i r_j r_k) (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) - r_i r_j r_k \frac{\partial}{\partial r_l} (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \right\}
 \end{aligned}$$

B. Integrals

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4\pi} \left\{ \left[\frac{1}{r^7} \frac{-m_0 r_l e^{-m_0 r}}{r} + e^{-m_0 r} \frac{-7r_l}{r^9} \right] \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij} \right) \right] - r_i r_j r_k (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \\
&\quad + \frac{e^{-m_0 r}}{r^7} \left\{ \left(2m_0^2 r_l + 3m_0 \frac{r_l}{r} \right) \left[r_i r_j r_k (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) \right] \right. \\
&\quad \left. + (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[(m_0 r + 5) (\delta_{il} r_j r_k + r_i \delta_{jl} r_k + r_i r_j \delta_{kl}) + r_i r_j r_k r_l \frac{m_0}{r} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2r_l (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) - r^2 (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{kl} \delta_{ij}) \right] \right. \\
&\quad \left. \left. - (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij}) (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) - r_i r_j r_k \left(2m_0^2 2r_l + 3m_0 \frac{r_l}{r} \right) \right\} \right\} \\
\\
&= -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^9} \left\{ - (m_0 r + 7) \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k r_l (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + \delta_{ij} r_k r_l) \right] - r_i r_j r_k r_l (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \right. \\
&\quad + (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \left[r_i r_j r_k r_l (m_0 r + 5) - r^2 (r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l + \delta_{ij} r_k r_l) \right] \\
&\quad + (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r^2 (m_0 r + 5) (\delta_{il} r_j r_k + r_i \delta_{jl} r_k + r_i r_j \delta_{kl}) \right. \\
&\quad \left. + m_0 r r_i r_j r_k r_l - 2r^2 (r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l + r_k \delta_{ij} r_l) - r^4 (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{kl} + \delta_{ij}) \right] \\
&\quad \left. \left. - r^2 (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) (\delta_{il} r_j r_k + r_i \delta_{jl} r_k + \delta_{kl} r_i r_j) - r_i r_j r_k r_l (4m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\} \right\}
\end{aligned}$$

B. Integrals

$$\begin{aligned}
&= -\frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^9} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[-r_i r_j r_k r_l [(m_0 r + 5)(m_0 r + 7) - m_0 r] + r^2 \left[(m_0 r + 5)(\delta_{il} r_j r_k \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + r_i \delta_{jl} r_k + r_i r_j \delta_{kl}) + (m_0 r + 7)(r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l + \delta_{ij} r_k r_l) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2(r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l + r_k \delta_{ij} r_l) - r^2(\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{kl} \delta_{ij}) \right] \right] \\
&\quad (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \left[r_i r_j r_k r_l \left((m_0 r + 5) + (m_0 r + 7) \right) \right. \\
&\quad \left. - r^2 \left((r_i \delta_{jk} r_l + r_j \delta_{ik} r_l + \delta_{ij} r_k r_l) + (\delta_{il} r_j r_k + r_i \delta_{jl} r_k + \delta_{kl} r_i r_j) \right) \right] \\
&\quad \left. - r_i r_j r_k r_l (4m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^{-m_0 r}}{4\pi r^9} \left\{ (m_0^2 r^2 + 3m_0 r + 3) \left[r_i r_j r_k r_l \left[(m_0 r + 5)(m_0 r + 7) - m_0 r \right] - r^2 (m_0 r + 5) \left[r_i (\delta_{jk} r_l \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + r_j \delta_{kl}) + r_j (r_k \delta_{il} + \delta_{ik} r_l) + r_k (\delta_{ij} r_l + r_i \delta_{jl}) \right] + r^4 (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{kl} \delta_{ij}) \right] \\
&\quad - (2m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \left[r_i r_j r_k r_l 2(m_0 r + 6) - r^2 \left[r_i (\delta_{jk} r_l + r_j \delta_{kl}) + r_j (r_k \delta_{il} + \delta_{ik} r_l) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + r_k (\delta_{ij} r_l + r_i \delta_{jl}) \right] \right] + r_i r_j r_k r_l (4m_0^2 r^2 + 3m_0 r) \right\}
\end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] T. Pang. *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press, 10 de jun. de 2010. 402 Seiten. ISBN: 0521532760. DOI: 10.1017/cbo9780511800870.003.
- [2] A. Klein e A. Godunov. *Introductory Computational Physics*. Cambridge University Press (CUP), 11 de out. de 2005. ISBN: 0521828627. DOI: 10.1017/cbo9780511793219.002.
- [3] J. Thijssen. *Computational Physics*. Cambridge University Press, 22 de mar. de 2007. 638 Seiten. ISBN: 0521833469. DOI: 10.1017/cbo9781139171397.
- [4] J. Franklin. *Computational Methods for Physics*. Cambridge University Press, 23 de mai. de 2013. 420 Seiten. ISBN: 1107034302. DOI: 10.1017/cbo9781139525398.
- [5] P. O. J. Scherer. *Computational Physics*. Springer, 30 de jul. de 2013. 472 Seiten. ISBN: 331900400X. DOI: 10.1007/978-3-319-00401-3.
- [6] S. Sirca e M. Horvat. *Computational Methods for Physicists*. Springer, 17 de dez. de 2012. 736 Seiten. ISBN: 3642324770. DOI: 10.1007/978-3-642-32478-9.
- [7] H. Rafii-Tabar. *Computational Physics of Carbon Nanotubes*. Cambridge University Press (CUP), 26 de jan. de 2016. 493 Seiten. ISBN: 0521853001. DOI: 10.1017/cbo9780511541278.
- [8] M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej e J. Leszczynski, eds. *Non-Linear Optical Properties of Matter*. Springer Netherlands, 3 de mai. de 2007. DOI: 10.1007/1-4020-4850-5.
- [9] F. A. Buot. *Nonequilibrium Quantum Transport Physics in Nanosystems*. World Scientific Pub Co Pte Lt, 11 de abr. de 2009. 815 Seiten. ISBN: 9812566791. DOI: 10.1142/9789812835376.

Bibliografia

- [10] M. El-Batanouny e F. Wooten. *Symmetry and Condensed Matter Physics: A Computational Approach*. Cambridge University Press (CUP), 11 de mai. de 2008. 922 Seiten. ISBN: 0521828457. DOI: 10.1017/cbo9780511755736.
- [11] W. A. Sokalski, ed. *Molecular Materials with Specific Interactions*. Springer-Verlag GmbH, 26 de mar. de 2007. X pp. ISBN: 1402053711. DOI: 10.1007/1-4020-5372-x.
- [12] P. Wallace. «The Band Theory of Graphite». Em: *Phys. Rev.* 71.9 (mai. de 1947), pp. 622–634. ISSN: 1536-6065. DOI: 10.1103/physrev.71.622.
- [13] G. Semenoff. «Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly». Em: *Physical Review Letters* 53.26 (dez. de 1984), pp. 2449–2452. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/physrevlett.53.2449.
- [14] C. Weeks e M. Franz. «Interaction-driven instabilities of a Dirac semimetal». Em: *Physical Review B* 81.8 (fev. de 2010), p. 085105. DOI: 10.1103/physrevb.81.085105.
- [15] A. K. Geim. «Graphene: Status and Prospects». Em: *Science* 324.5934 (jun. de 2009), pp. 1530–1534. DOI: 10.1126/science.1158877. eprint: 0906.3799.
- [16] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim. «The electronic properties of graphene». Em: *Reviews of Modern Physics* 81.1 (jan. de 2009), pp. 109–162. DOI: 10.1103/revmodphys.81.109. eprint: 0709.1163.
- [17] J. K. Pachos. «Manifestations of topological effects in graphene». Em: *Contemporary Physics* 50.2 (mar. de 2009), pp. 375–389. DOI: 10.1080/00107510802650507. eprint: 0812.1116.
- [18] N. M. Peres. «Graphene, new physics in two dimensions». Em: *Europhysics News* 40.3 (mai. de 2009), pp. 17–20. ISSN: 1432-1092. DOI: 10.1051/epn/2009501.
- [19] A. Shytov, M. Rudner, N. Gu, M. Katsnelson e L. Levitov. «Atomic collapse, Lorentz boosts, Klein scattering, and other quantum-relativistic phenomena in graphene». Em: *Sol. State Comm.* 149.27-28 (jul. de 2009), p. 1087. DOI: 10.1016/j.ssc.2009.02.043. eprint: 0812.1412.
- [20] K.-i. Sasaki e R. Saito. «Pseudospin and Deformation-induced Gauge Field in Graphene». Em: *Progress of Theoretical Physics Supplement* 176 (2008), p. 253. DOI: 10.1143/PTPS.176.253. eprint: 0810.4192.

Bibliografia

- [21] F. Guinea, B. Horovitz e P. L. Doussal. «Gauge field induced by ripples in graphene». Em: *Physical Review B* 77.20 (mai. de 2008), p. 205421. DOI: 10.1103/physrevb.77.205421.
- [22] A. K. Geim e A. H. MacDonald. «Graphene: Exploring carbon flatland». Em: *Phys. Today* 60.8 (ago. de 2007), pp. 35–41. ISSN: 1945-0699. DOI: 10.1063/1.2774096.
- [23] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov e J. P. Carbotte. «AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics». Em: *International Journal of Modern Physics B* 21.27 (out. de 2007), pp. 4611–4658. DOI: 10.1142/S0217979207038022. eprint: 0706.3016.
- [24] M. I. Katsnelson. «Graphene: carbon in two dimensions». Em: *Materials Today* 10.1-2 (jan. de 2007), number1–2, pp.20–27. DOI: 10.1016/S1369-7021(06)71788-6. eprint: cond-mat/0612534.
- [25] F. de Juan, A. Cortijo e M. A. Vozmediano. «Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets». Em: *Physical Review B* 76.16 (out. de 2007), p. 165409. DOI: 10.1103/physrevb.76.165409.
- [26] M. Vozmediano, M. Katsnelson e F. Guinea. «Gauge fields in graphene». Em: *Physics Reports* 496.4-5 (nov. de 2010), pp. 109–148. ISSN: 0370-1573. DOI: 10.1016/j.physrep.2010.07.003.
- [27] M. A. H. Vozmediano, F. de Juan e A. Cortijo. «Gauge fields and curvature in graphene». Em: *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 129. 1. IOP Publishing, out. de 2008, p. 012001. DOI: 10.1088/1742-6596/129/1/012001.
- [28] A. Cortijo e M. A. Vozmediano. «Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene». Em: *Nuclear Physics B* 763.3 (fev. de 2007), pp. 293–308. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2006.10.031.
- [29] M. I. Katsnelson. *Graphene: carbon in two dimensions*. Cambridge University Press, 2012.
- [30] D. P. Landau e K. Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2014.

Bibliografia

- [31] D. P. Landau e K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 13 de nov. de 2014. 538 Seiten. ISBN: 1107074029. DOI: 10.1017/cbo9781139696463.
- [32] J. Sucher. «The Concept of Potential in Quantum Field Theory». Em: (2008). DOI: 10.1103/physrev.186.1656. eprint: hep-ph/9412388.
- [33] J. Sucher. «What is the Force between Electrons?» Em: (2007), pp. 433–443. DOI: 10.1016/s0065-3276(08)60521-3. eprint: hep-ph/9706219.
- [34] G. Feinberg, J. Sucher e C.-K. Au. «The dispersion theory of dispersion forces». Em: *Physics Reports* 180.2 (1989), pp. 83–157.
- [35] J. Sucher. «Potentials from field theory: Non-uniqueness, Gauge dependence and all that». Em: *AIP Conference Proceedings*. Vol. 189. AIP Publishing, 1989, p. 337. DOI: 10.1063/1.38421.
- [36] B. A. Dobrescu e I. Mocioiu. «Spin-dependent macroscopic forces from new particle exchange». Em: *Journal of High Energy Physics* 2006.11 (nov. de 2006), p. 005. DOI: 10.1088/1126-6708/2006/11/005. eprint: hep-ph/0605342.
- [37] J. Moody e F. Wilczek. «New macroscopic forces?» Em: *Physical Review D* 30.1 (jul. de 1984), pp. 130–138. DOI: 10.1103/physrevd.30.130.
- [38] F. A. G. Ferreira, P. C. Malta, L. P. R. Ospedal e J. A. Helayël-Neto. «Topologically massive spin-1 particles and spin-dependent potentials». Em: *The European Physical Journal C* 75.5 (mai. de 2015), pp. 1–10. DOI: 10.1140/epjc/s10052-015-3470-1.
- [39] P. C. Malta, L. P. R. Ospedal, K. Veiga e J. A. Helayël-Neto. «Comparative Aspects of Spin-Dependent Interaction Potentials for Spin-1/2 and Spin-1 Matter Fields». Em: *Advances in High Energy Physics* 2016 (2015), pp. 1–13. DOI: 10.1155/2016/2531436.
- [40] J. A. Helayël-Neto, E. Konstantinova e R. S. Martins. «Scalar-Interchange Potential and Magnetic/Thermodynamic Properties of Graphene-like Materials». Em: *Journal of Advances in Physics* 9.2 (2015), p. 2401. ISSN: 2347-3487. arXiv: 1409.0238v1 [cond-mat.mes-hall].

Bibliografia

- [41] H. Pei-Song, O. Sung-Jin, C. Yu e T. Guang-Shan. «Specific Heat and Magnetic Susceptibility of Graphene: A Renormalization Group Study». Em: *Communications in Theoretical Physics* 54.5 (nov. de 2010), pp. 897–907. DOI: 10.1088/0253-6102/54/5/24.
- [42] R. S. Martins, E. Konstantinova, H. Belich e J. A. Helayël-Neto. «Physical Properties of Graphene-like Samples with Kekulé and Vacuum Polarization Corrections». Em: (12 de jul. de 2016). arXiv: 1607.03529v2 [cond-mat.mes-hall].
- [43] J. W. McClure. «Diamagnetism of Graphite». Em: *Phys. Rev.* 104.3 (nov. de 1956), pp. 666–671. ISSN: 1536-6065. DOI: 10.1103/physrev.104.666.
- [44] J. Slonczewski e P. Weiss. «Band Structure of Graphite». Em: *Phys. Rev.* 109.2 (jan. de 1958), pp. 272–279. ISSN: 1536-6065. DOI: 10.1103/physrev.109.272.
- [45] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos et al. «Electric field effect in atomically thin carbon films». Em: *Science* 306.5696 (out. de 2004), pp. 666–669. DOI: 10.1126/science.1102896. eprint: cond-mat/0410550.
- [46] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov e A. K. Geim. «Two-dimensional atomic crystals». Em: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 102.30 (jul. de 2005), pp. 10451–10453. DOI: 10.1073/pnas.0502848102. eprint: cond-mat/0503533.
- [47] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva et al. «Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene». Em: *Nature* 438.7065 (nov. de 2005), pp. 197–200. DOI: 10.1038/nature04233. eprint: cond-mat/0509330.
- [48] A. C. Neto, F. Guinea e N. M. Peres. «Drawing conclusions from graphene». Em: *Physics World* 19.11 (nov. de 2006), p. 33. DOI: 10.1088/2058-7058/19/11/34.
- [49] M. I. Katsnelson e K. S. Novoselov. «Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics». Em: *Solid State Communications* 143.1-2 (jul. de 2007), pp. 3–13. DOI: 10.1016/j.ssc.2007.02.043. eprint: cond-mat/0703374.

Bibliografia

- [50] F. Guinea, B. Horovitz e P. L. Doussal. «Gauge fields, ripples and wrinkles in graphene layers». Em: *Solid State Communications* 149.27-28 (jul. de 2008), pp. 1140–1143. DOI: 10.1016/j.ssc.2009.02.044. eprint: 0811.4670.
- [51] E. Prada, P. San-Jose, G. León, M. M. Fogler e F. Guinea. «Singular elastic strains and magnetoconductance of suspended graphene». Em: *Phys. Rev. B* 81.16 (abr. de 2010), 161402(2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.161402. eprint: 0906.5267.
- [52] C. Chamon. «Solitons in carbon nanotubes». Em: *Physicl Review B* 62.4 (jul. de 2000), p. 2806. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.2806.
- [53] C.-Y. Hou, C. Chamon e C. Mudry. «Electron fractionalization in two-dimensional graphenelike structures». Em: *Physical Review Letters* 98.18 (mai. de 2007), p. 186809. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.186809. eprint: cond-mat/0609740.
- [54] R. Jackiw e S.-Y. Pi. «Chiral gauge theory for graphene». Em: *Physical Review Letters* 98.26 (jun. de 2007), p. 266402. DOI: 10.1103/physrevlett.98.266402. eprint: cond-mat/0701760.
- [55] J. González, F. Guinea e M. Vozmediano. «The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation». Em: *Nuclear Physics B* 406.3 (out. de 1993), pp. 771–794. ISSN: 0550-3213. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90009-e.
- [56] T. Low, F. Guinea e M. Katsnelson. «Gaps tunable by electrostatic gates in strained graphene». Em: *Physical Review B* 83.19 (2011), p. 195436.
- [57] S. Morozov, K. Novoselov, M. Katsnelson, F. Schedin, L. Ponomarenko, D. Jiang e A. Geim. «Strong Suppression of Weak Localization in Graphene». Em: *Physical review letters* 97.1 (jul. de 2006), p. 016801. DOI: 10.1103/physrevlett.97.016801.
- [58] F. de Juan, A. Cortijo, M. A. Vozmediano e A. Cano. «Aharonov-Bohm interferences from local deformations in graphene». Em: *Nature Physics* 7.10 (jul. de 2011), pp. 810–815. DOI: 10.1038/nphys2034.
- [59] C. Kittel. *Introduction to solid state*. Vol. 162. John Wiley & Sons, 1966.
- [60] C. Kittel e C.-y. Fong. *Quantum theory of solids*. Vol. 33. Wiley New York, 1963.
- [61] C. Kittel. *Elementary statistical physics*. Courier Corporation, 2004.

Bibliografia

- [62] C. Kittel e D. F. Holcomb. «Introduction to solid state physics». Em: *American Journal of Physics* 35.6 (1967), pp. 547–548.
- [63] N. Ashcroft e N. Mermin. *Solid State Physics*. 2008, p. 45.
- [64] S. K. Pati, T. Enoki e C. N. R. Rao. *Graphene and its fascinating attributes*. World Scientific, 2011.
- [65] T. Georgiou, L. Britnell, P. Blake, R. Gorbachev, A. Gholinia, A. Geim et al. «Graphene bubbles with controllable curvature». Em: *Applied Physics Letters* 99.9 (2011), p. 093103.
- [66] F. W. Hehl, P. Von der Heyde, G. D. Kerlick e J. M. Nester. «General relativity with spin and torsion: Foundations and prospects». Em: *Reviews of Modern Physics* 48.3 (1976), p. 393.
- [67] R. Wieser, U. Nowak e K.-D. Usadel. «Domain wall mobility in nanowires: Transverse versus vortex walls». Em: *Physical Review B* 69.6 (2004), p. 064401.
- [68] C. Chamon, C.-Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S.-Y. Pi e A. P. Schnyder. «Irrational versus rational charge and statistics in two-dimensional quantum systems». Em: *Physical Review Letters* 100.11 (mar. de 2008), p. 110405. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.110405. eprint: 0707.0293.
- [69] C. Chamon, C.-Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S.-Y. Pi e G. Semenoff. «Electron fractionalization for two-dimensional Dirac fermions». Em: *Physical Review B* 77.23 (jun. de 2008), p. 235431. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.235431. eprint: 0712.2439.
- [70] E. M. C. Abreu, M. A. De Andrade, L. P. G. De Assis, J. A. Helayël-Neto, A. L. M. A. Nogueira e R. C. Paschoal. «A supersymmetric model for graphene». Em: *Journal of High Energy Physics* 2011.5 (mai. de 2011). ISSN: 1029-8479. DOI: 10.1007/jhep05(2011)001. eprint: 1002.2660.
- [71] A. K. Geim e K. S. Novoselov. «The rise of graphene». Em: *Nature Materials* 6.3 (mar. de 2007), pp. 183–191. DOI: 10.1038/nmat1849. eprint: cond-mat/0702595.

Bibliografia

- [72] F. D. M. Haldane. «Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly”». Em: *Physical Review Letters* 61.18 (out. de 1988), pp. 2015–2018. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/physrevlett.61.2015.
- [73] E. Marino, L. O. Nascimento, V. S. Alves e C. M. Smith. «Interaction Induced Quantum Valley Hall Effect in Graphene». Em: *Physical Review X* 5.1 (mar. de 2015), p. 011040. DOI: 10.1103/physrevx.5.011040.
- [74] B. Seradjeh e M. Franz. «Fractional statistics of topological defects in graphene and related structures». Em: *Physical review letters* 101.14 (set. de 2008), p. 146401. DOI: 10.1103/physrevlett.101.146401.
- [75] A. E. Obispo e M. Hott. «Fractional fermion charges induced by axial-vector and vector gauge potentials and parity anomaly in planar graphenelike structures». Em: *Physical Review B* 89.16 (abr. de 2014), p. 165405. DOI: 10.1103/physrevb.89.165405. eprint: 1206.0289.
- [76] A. J. Niemi e G. W. Semenoff. «Fermion number fractionization in quantum field theory». Em: *Physics Reports* 135.3 (abr. de 1986), pp. 99–193. DOI: 10.1016/0370-1573(86)90167-5.
- [77] Y. A. Krotov, D.-H. Lee e S. G. Louie. «Low energy properties of (n, n) carbon nanotubes». Em: *Physical review letters* 78.22 (jun. de 1997), pp. 4245–4248. DOI: 10.1103/physrevlett.78.4245.
- [78] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth e S. Roth. «The structure of suspended graphene sheets». Em: *Nature* 446.7131 (mar. de 2007), pp. 60–63. DOI: 10.1038/nature05545.
- [79] Y. Sitenko e N. Vlasii. «Electronic properties of graphene with a topological defect». Em: *Nuclear Physics B* 787.3 (dez. de 2007), pp. 241–259. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2007.06.001.
- [80] E.-A. Kim e A. H. C. Neto. «Graphene as an electronic membrane». Em: *EPL (Europhysics Letters)* 84.5 (dez. de 2008), p. 57007. DOI: 10.1209/0295-5075/84/57007.

Bibliografia

- [81] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea et al. «Strain-Induced Pseudo-Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles». Em: *Science* 329.5991 (jul. de 2010), pp. 544–547. DOI: 10.1126/science.1191700.
- [82] A. Cortijo. Tese de doutoramento. Universidad Carlos III, 2007.
- [83] T. Fujita, M. B. A. Jalil, S. G. Tan e S. Murakami. «Gauge fields in spintronics». Em: *Journal of Applied Physics* 110.12 (dez. de 2011), p. 121301. DOI: 10.1063/1.3665219.
- [84] P. He. «Magnetic susceptibility of graphene by gaussian correction». Em: *International Journal of Modern Physics B* 25.15 (jun. de 2011), pp. 1981–1991. DOI: 10.1142/s0217979211101636.
- [85] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller. «Equation of State Calculations by Fast Computing Machines». Em: *The Journal of Chemical Physics* 21.6 (1953), p. 1087. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.1699114.
- [86] K. Binder e G. Ciccotti. *Monte Carlo and molecular dynamics of condensed matter systems*. Vol. 49. Compositori, 1996.
- [87] T. L. Makarova, B. Sundqvist, R. Höhne, P. Esquinazi, Y. Kopelevich, P. Scharff et al. «Retraction: Magnetic carbon». Em: *Nature* 440.7084 (mar. de 2006), pp. 707–707. DOI: 10.1038/nature04622.
- [88] P. Esquinazi e R. Höhne. «Magnetism in carbon structures». Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 290 (abr. de 2005), pp. 20–27. DOI: 10.1016/j.jmmm.2004.11.154.
- [89] P. Esquinazi, A. Setzer, R. Höhne, C. Semmelhack, Y. Kopelevich, D. Spemann et al. «Ferromagnetism in oriented graphite samples». Em: *Physical Review B* 66.2 (jul. de 2002), p. 024429. DOI: 10.1103/physrevb.66.024429.
- [90] R. Höhne e P. Esquinazi. «Can Carbon Be Ferromagnetic?» Em: *Advanced Materials* 14.10 (mai. de 2002), pp. 753–756. DOI: 10.1002/1521-4095(20020517)14:10<753::aid-adma753>3.0.co;2-d.

Bibliografia

- [91] T. L. Makarova, B. Sundqvist, R. Höhne, P. Esquinazi, Y. Kopelevich, P. Scharff et al. «Magnetic carbon». Em: *Nature* 413.6857 (2001), pp. 716–718.
- [92] L. P. R. Ospedal, T. Micklitz e J. A. Helayël-Neto. «Trabalho em andamento». Em: (2016).
- [93] L. P. R. Ospedal. «Tese em desenvolvimento». CBPF, 2016.