

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

SIMETRIAS DE NOETHER DO MODELO DE JACKIW-PI PARA BICAMADA DE GRAFENO

Noether Symmetries for the Two-Layer Graphene Jackiw-Pi Model

Jackson Galvão

Porto Alegre
2024

JACKSON GALVÃO

**SIMETRIAS DE NOETHER DO MODELO DE JACKIW-PI
PARA BICAMADA DE GRAFENO**

Noether Symmetries for the Two-Layer Graphene Jackiw-Pi Model

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Fernando Haas e apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da UFRGS em preenchimento final dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Porto Alegre
2024

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos aos que estiveram presentes nesse período de estudos:

Ao meu orientador, professor Fernando Haas, pela proposta inicial deste trabalho, pelas lições, por sua paciência e amizade.

Às minhas filhas, gêmeas, Maria Alice e Luísa, luzes da minha vida: meu amor por vocês não tem limites.

À Rosa, pela companhia em momentos bons e ruins.

À professora Maria Beatriz Gay Ducati pelos bons conselhos e ensinamentos e aos professores Emerson Luna e Rudi Gaelzer, pela disposição e ensinamentos. Ao PPGFis¹ através dos membros da CPG² e da Secretaria do IF-UFRGS³ que, sempre com agilidade e profissionalismo, atenderam todas as demandas das quais necessitei. A todos os colegas do PPGFis com quem pude trocar boas ideias e experiências.

Ao CNPq⁴ pelo apoio financeiro, sem o qual, a realização deste trabalho não seria possível.

¹ Programa de Pós-Graduação em Física.

² Comissão de Pós-Graduação.

³ Instituto de Física da UFRGS.

⁴ Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

Fim dos tempos. Ahasverus,
sentado em uma rocha, fita longamente o horizonte,
onde passam duas águias cruzando-se.
Medita, depois sonha.
Vai declinando o dia.

Viver! – Machado de Assis

RESUMO

A relação intrínseca entre propriedades de simetria e leis de conservação de um sistema mecânico é considerada fundamental, não sendo exclusiva da mecânica clássica, mas também observada na mecânica quântica, na teoria quântica de campos e demais áreas da física. Esta relação corresponde à invariância do sistema sob certas transformações matemáticas, o que define uma lei de conservação associada. Em contrapartida, a descoberta de que certas folhas planas de grafite – designadas como grafeno – possuem estabilidade sob condições experimentais apropriadas, abriu um novo campo de pesquisa voltado para uma tecnologia inovadora de dispositivos eletrônicos, valendo a Konstantin Novoselov e Andre Geim o Prêmio Nobel de Física de 2010. A partir daí, diferentes conformações estruturais do grafeno foram desenvolvidas; uma delas é a bicamada de grafeno. Num contexto de relevância do estudo deste material, para além das conhecidas interações de Van der Waals presentes na bicamada, há uma série de fenômenos cujas propriedades físicas são de elevada importância na pesquisa básica: a existência de cargas fracionárias que resultam de modos zero de Dirac (pontos de Dirac) presentes na primeira zona de Brillouin da rede cristalina formado pelo grafeno; este fracionamento resulta em um efeito Hall quântico aprimorado; elétrons com velocidade de Fermi com comportamento semelhante ao de fótons e por isso considerados destituídos de massa, com efeitos relativísticos. R. Jackiw e S.-Y. Pi aplicaram um campo de calibre para a oscilação de energia presente na primeira zona de Brillouin e postularam um *Ansatz*, estabelecendo um sistema de oscilações acopladas através de um par de equações diferenciais de primeira ordem lineares. A fim de verificar as leis de conservação deste sistema, consideramos uma formulação variacional que descreva o sistema, apresentando simetrias de Noether. A partir do hamiltoniano, não-trivial para o caso, é construída uma lagrangiana e o problema é tratado através dos métodos de simetrias e invariantes de Noether, a fim de encontrar constantes de movimento. Este processo é fundamentado em transformações infinitesimais constituindo uma álgebra de Lie. Através da equação de Pinney, determinou-se uma solução analítica para o par de equações proposto, inexistente na literatura até o presente momento.

Palavras-chave: *Equações Diferenciais, Sistemas Não-lineares, Equação de Pinney, Sistemas Integráveis, Teorema de Noether, Oscilador Harmônico Dependente do Tempo, Modelo de Jackiw-Pi, Grafeno.*

ABSTRACT

The intrinsic relationship between symmetry properties and conservation laws of a mechanical system is considered a fundamental relationship, not exclusive to classical mechanics, but also observed in quantum mechanics, quantum field theory and other areas in physics. This relation corresponds to the invariance of the system under certain mathematical transformations, which defines an associated conservation law. On the other hand, the discovery that certain flat sheets of graphite – designated as graphene – have stability under appropriate experimental conditions, opened a new field of research oriented to innovative technology of electronic devices, resulted to Konstantin Novoselov and Andre Geim the Nobel Prize of Physics 2010. From there, different structural conformations of graphene have been developed; one of which is the graphene bilayer. In a relevant context about study of this material, beyond known Van der Waals interactions present in the bilayer, there are a series of phenomena whose physical properties are of high importance in basic research: the existence of fractional charges that result from zero Dirac modes (Dirac points) present in the first Brillouin zone of the crystal lattice formed by graphene; this fractionation results in an enhanced quantum Hall effect; electrons with Fermi speed with photons-like behavior and therefore considered devoid of mass, with relativistic effects. R. Jackiw and S.-Y. Pi applied a gauge field to the energy oscillation present in the first Brillouin zone and postulated an *Ansatz*, establishing a system of coupled oscillations through a pair of linear first-order differential equations. In order to verify the conservation laws of this system, we consider a variational formulation that describes the system and that presents the Noether's symmetry relations. From the Hamiltonian, non-trivial for the case, a Lagrangian is constructed and we start to treat the problem through the methods of symmetries and Noether's invariants, in order to find constants of motion. This process is based on infinitesimal transformations forming a Lie algebra. By means of Pinney's equation, we found an analytical solution for the proposed pair of equations, non-existent in the literature until the present moment.

Keywords: *Differential Equations, Pinney's Equation, Nonlinear Systems, Integrable Systems, Noether's Theorem, Time Dependent Harmonic Oscillator, Jackiw-Pi Model, Graphene.*

SIMETRIAS DE NOETHER DO MODELO DE JACKIW-PI PARA BICAMADA DE GRAFENO (PRESS RELEASE)

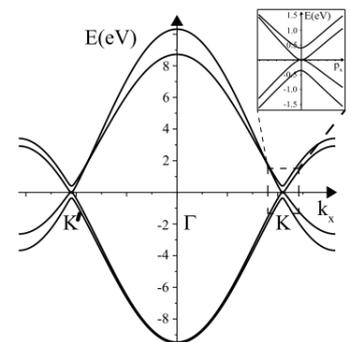
Amalie Emmy Noether (1882 – 1935) foi uma mulher à frente do seu tempo. Uma matemática alemã conhecida por contribuições de grande impacto na física teórica e álgebra abstrata. David Hilbert, Albert Einstein e Hermann Weyl consideravam-na como a mulher da matemática mais importante de toda a história. Seu teorema, conhecido como Teorema de Noether, explica a conexão fundamental existente entre a simetria na física e as leis de conservação.



Amalie Emmy Noether
(1882 1935).

Tempos mais tarde, em meados da década de 50, surge uma teoria que descreve um material cuja estrutura é dada por uma cadeia de átomos de carbono ligados numa geometria hexagonal, semelhante a um favo de mel, formando uma rede cristalina plana. Esta estrutura, que foi denominada de grafeno em 1994 e obtida experimentalmente no ano de 2004, valeu a Novoselov e Geim o Prêmio Nobel de Física de 2010. É um material revolucionário do ponto de vista de sua obtenção e de suas aplicações, onde se abriu um novo campo de pesquisa voltado para a tecnologia inovadora de dispositivos eletrônicos. Além disto, há uma gama de fenômenos físicos diretamente ligados às pesquisas básicas em física.

No ano de 2008, R. Jackiw e S.-Y. Pi publicaram um trabalho na revista *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, intitulado *Persistence of zero modes in a gauged Dirac model for bilayer graphene*. Neste trabalho, foi apresentado um modelo matemático para a oscilação de energia presente em cada vértice da estrutura hexagonal (pontos de Dirac - K , K') da bicamada de grafeno, o que determinou um sistema de oscilações acopladas através de um par de equações diferenciais de primeira ordem lineares.



Nosso trabalho se empenhou em buscar uma solução analítica para este par de equações e para isto, fizemos uso do Teorema de Noether como ferramenta da Física-Matemática, obtendo as constantes de movimento deste sistema oscilatório acoplado.

Espectro de energia em
torno dos pontos K e K.

Palavras-chave: Equações Diferenciais, Sistemas Não-lineares, Equação de Pinney, Sistemas Integráveis, Teorema de Noether, Modelo de Jackiw-Pi, Grafeno.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	9
1 O GRAFENO E O MODELO DE JACKIW-PI	13
1.1 ESTRUTURA BÁSICAS DO GRAFENO	14
1.2 DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA	16
1.3 FUNÇÕES DE ONDA E ESPECTRO DE ENERGIA	18
1.4 A BICAMADA DE GRAFENO	24
1.5 MODELO DE DIRAC CALIBRADO	25
1.6 O MODELO DE JACKIW-PI	29
2 O HAMILTONIANO PARA O MODELO DE JACKIW-PI	33
2.1 HAMILTONIANO DO SISTEMA	33
2.2 TRANSFORMADA DE LEGENDRE INVERSA	35
2.3 LAGRANGIANO DO SISTEMA	35
2.4 A EQUAÇÃO DE PINNEY	37
3 SIMETRIAS E LEIS DE CONSERVAÇÃO	39
3.1 SIMETRIAS DE LIE	40
3.2 TEOREMA E INVARIANTE DE NOETHER	42
3.3 SISTEMAS INTEGRÁVEIS: COLCHETES DE POISSON	44
4 APLICAÇÃO DO TEOREMA DE NOETHER À BICAMADA DE GRAFENO	47
4.1 SIMETRIAS DE NOETHER DO MODELO DE JACKIW-PI	47

4.2	SIMETRIA ALGÉBRICA E O INVARIANTE DE NOETHER .	53
4.3	ABORDAGEM DIRETA	57
4.4	EXEMPLO	57
5	CONCLUSÕES	60
	REFERÊNCIAS	62

INTRODUÇÃO

A descoberta de que há uma relação intrínseca entre propriedades de simetria e leis de conservação de um sistema mecânico conta desde o início do século XX, tendo adquirido uma grande importância na física, não sendo exclusiva da mecânica clássica. Também é observada na mecânica quântica, na teoria quântica de campos e ainda em outras áreas da física. Constitui-se numa relação fundamental da física a vinculação entre simetrias e leis de conservação [1]. Em física, simetria se refere a um conjunto de transformações que leva um determinado objeto matemático ser invariante em sua forma, ou ainda, que certo sistema é invariante sob o parâmetro de transformação aplicado [2]. Essa relação entre propriedades de simetria de um sistema mecânico, correspondendo à invariância deste sistema sob certas transformações, é o que define a lei de conservação associada ao sistema.

Algumas décadas mais tarde, em contrapartida, temos a descoberta de que certas folhas planas de grafite - comumente designadas como grafeno - possuem estabilidade sob condições experimentais apropriadas. Isto abriu um novo campo de pesquisa voltado para a tecnologia inovadora de dispositivos eletrônicos baseados no grafeno. Estas experiências [3] valeram a Konstantin Novoselov e Andre Geim o Prêmio Nobel de Física de 2010. O termo *grafeno* foi recomendado pela IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) no ano de 1994, sendo originalmente proposto por Hanns-Peter Boehm em 1961 [4], Ralph Setton e Eberhard Stupp. Eles foram responsáveis por identificar e isolar folhas simples do grafeno através do processo de microscopia de transmissão eletrônica e difração por raios-X. Uma série de aplicações do grafeno são descritas em um manual que abrange diferentes áreas do conhecimento e trazem perspectivas de seu uso [5]. Uma das principais aplicabilidades, para citar um exemplo, sugere a produção de biomarcadores desenvolvidos a partir da estrutura do grafeno. O principal mecanismo de transporte dos portadores de carga ocorre por um efeito Hall quântico aprimorado acompanhado por uma fase geométrica de Berry não nula, a qual já foi observada experimentalmente [6].

O presente trabalho tem por objetivo realizar um estudo de revisão das relações entre as leis de conservação e simetrias de sistemas físicos, na área de Física-Matemática, utilizando o grafeno como exemplo de aplicação. Diante da presente relevância que o grafeno tem tomado, não somente em termos de aplicação tecnológica mas principalmente no estudo de propriedades físicas de elevada importância dentro da pesquisa básica, buscamos um modelo de descrição em que as leis de conservação e simetria sejam aplicáveis. Este modelo corresponde ao proposto por Jackiw-Pi para bicamada de grafeno [7]. Os esforços são direcionados em aplicar o teorema

de Noether para solucionar um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) acopladas, estudando os métodos matemáticos correspondentes e abordando as simetrias e invariantes de Noether [8]. Do resultado, é apresentada uma solução analítica original [9]. Com isso, deve ficar claro que nosso foco estará nas equações do modelo de Jackiw-Pi, não sendo objeto central deste trabalho o estudo aprofundado das propriedades físicas do grafeno que não sejam aquelas já expostas e bem estabelecidas em diversas literaturas. Assim, a física do grafeno é apresentada, aqui, exclusivamente como uma contextualização para o estudo de sistemas que envolvam simetrias e leis de conservação, temas próprios da Física-Matemática.

Jackiw e Pi propuseram um modelo que analisa o comportamento de interações acopladas entre os portadores de carga e a propagação de energia por ondas em uma rede cristalina de grafeno [7]. Desde meados dos anos de 1940, outros modelos também vinham discutindo as interações do grafeno, avaliando diferentes fenômenos, embora a existência estável da camada simples ou da bicamadas ainda não houvesse sido obtida [10]. A bicamada de grafeno constitui-se na sobreposição de duas monocamadas similares, dispostas em planos sobrepostos onde ocorrem interações inter-camadas, sabidamente, interações de Van der Waals. O modelo de Jackiw-Pi visa compreender o comportamento dos elétrons nas bandas de valência e condução em termos de elétrons de Dirac e da propagação de ondas produzidas por estas interações [7, 10]. O surgimento do grafeno como substância planar verificada experimentalmente, trouxe à tona a discussão sobre os modos zero de Dirac e as cargas fracionárias de Dirac. Excitações de baixa energia podem ser descritas por uma equação de Dirac em duas dimensões espaciais. Para diversos padrões de dimerização do material, os campos efetivos de Dirac interagem com um campo escalar homogêneo, surgindo uma lacuna no espectro de Dirac [7, 11]. Em perfis topológicos característicos do material, há a possibilidade da ocorrência destas cargas fracionárias - férmions de Dirac - num intervalo de estado de energia média zero [7, 11, 12]. Para a aproximação de ligação forte em bicamada, existem dois pontos de Dirac. Se ocorrer uma dimerização particular, conhecida como distorção de Kekulé, o hamiltoniano de Dirac efetivo também passa a ter uma interação com um campo escalar no sistema [7].

Sob condições de autoestados de Dirac de energia zero, são calculadas as equações dos autovalores, o que resulta em duas EDOs lineares de primeira ordem acopladas, as quais conduzem-se ao modelo de Jackiw-Pi mencionado. Foi então desenvolvida uma descrição de Ermakov-Lewis para o modelo [13]. A partir daí, estabelecemos a hipótese da existência de alguma lei de conservação e de simetrias, associadas ao modelo. Construímos um hamiltoniano, que apresentou-se como não-trivial. As simetrias do sistema são construídas mediante uma álgebra de Lie, a qual permite a realização de transformações infinitesimais que produzem um invariante, o invariante de Noether. Este invariante, aplicado ao modelo, resulta nas constantes de movimento do sistema. O fundamento matemático para esta tarefa vem a partir do teorema de Noether, que permite determinar as constantes de movimento de um dado sistema a partir do lagrangiano que

o descreve. Este lagrangiano é obtida por uma transformada inversa de Legendre aplicada sobre o hamiltoniano que construímos. Se a descrição do modelo apresenta equações analiticamente solúveis, podemos afirmar que o sistema é integrável e obtermos com isso uma solução exata do sistema.

Feitas estas observações, estruturamos o presente trabalho da seguinte forma:

O Cap. 1, realiza uma breve revisão da estrutura e das características principais do grafeno e da bicamada de grafeno, buscando apresentar o que diversos textos e pesquisas já expõem sobre estes aspectos. Define-se a estrutura da monocamada, seus espectros de energia e são trazidos alguns aspectos matemáticos que caracterizam o sistema de um modo geral, estendidos para características da bicamada de grafeno. Na sequência, são apresentados os fundamentos que conduziram ao modelo de Jackiw-Pi para a bicamada de grafeno. Expusemos o conceito dos modos zero de Dirac, o qual é avaliado sob um campo de calibre, conforme proposto por Jackiw-Pi [7], que resultou em duas EDOs acopladas.

Para o Cap. 2, uma vez tendo definido o modelo de Jackiw-Pi para a bicamada de grafeno, apresentamos a hipótese de alguma lei de conservação e realizamos a construção de um hamiltoniano $H(q, p, t)$ que descreva o sistema em termos de variáveis dinâmicas, q, p . É feita então uma substituição conveniente de variáveis para a reformulação do modelo de Jackiw-Pi, apresentado em [13], que resulta em um hamiltoniano não-trivial em razão do campo de calibre aplicado. Sobre este hamiltoniano é aplicada uma transformada de Legendre inversa, obtendo-se o lagrangiano do sistema. Em sequência, é definida a equação de Pinney, a qual corresponde a uma equação diferencial não-linear de solução exata, crucial na busca da solução proposta. O capítulo apresenta-se adequado para exposição desta equação, definindo elementos matemáticos que fundamentam o que segue adiante no trabalho.

Posteriormente, no Cap. 3, apresentamos brevemente alguns elementos matemáticos para as relações de simetria e leis de conservação, fundamentais para encontrar as simetrias pontuais presentes no modelo de Jackiw-Pi para a bicamada de grafeno. Este processo se dá através da aplicação do teorema de Noether. Para tanto, são definidas transformações infinitesimais e geradores de simetria, advindos das simetrias de Lie que fundamentam uma álgebra de simetria mais geral, na qual o grupo de simetrias de Noether é um caso particular. Dadas certas transformações no espaço de variáveis induzidas por transformações infinitesimais, define-se o teorema de Noether numa breve construção. Obtém-se, a partir daí, o invariante de Noether, a partir do cálculo das simetrias de Noether, fazendo uso da equação de Pinney [14], estabelecida no Cap. 2. Ainda neste mesmo capítulo, é realizada uma revisão sobre sistemas integráveis, considerando os colchetes de Poisson entre as quantidades conservadas.

No Cap. 4, são aplicados os fundamentos matemáticos desenvolvidos e que permitem construir

as simetrias puntuais de Noether do modelo discutido. Identifica-se aí que o invariante de Noether corresponde à invariância do funcional da ação. O procedimento para calcular simetrias puntuais de Noether é bem conhecido [15], com o qual é aplicado uma sequência de procedimentos. Cinco soluções linearmente independentes são obtidas, das quais, duas podem ser destacadas levando a invariantes funcionalmente independentes para simetrias de Noether admissíveis. Estas aparecem na forma de um invariante de Ermakov-Lewis, em particular. Com isso, é obtido um par de equações de terceira e segunda ordens, correspondentes a um Oscilador Harmônico Dependente do Tempo (OHDT). A partir daí, é suposto para a simetria algébrica e para o invariante de Noether, uma solução não-trivial exata para o OHDT, sendo obtidas pela solução da equação de Pinney. Por fim, é feita uma abordagem direta utilizando um campo de calibre conhecido, onde é realizado um exemplo numérico como forma ilustrativa.

O Cap. 5 dedica-se a conclusão do trabalho, onde são avaliados aspectos relevantes da sua realização e de resultados obtidos. Também são apontados possíveis estudos em termos de trabalhos futuros, os quais levam em consideração as realizações deste trabalho.

1 O GRAFENO E O MODELO DE JACKIW-PI

Uma extensa literatura discute as propriedades e aplicações do átomo de carbono, com interesse em pesquisas envolvendo diferentes áreas [16]. Das três formas alotrópicas naturais do carbono (carbono amorfo, grafite e diamante), o grafeno é uma forma alotrópica sintética. Um sucessivo empilhamento das folhas do grafeno, numa ordem de espessura de um átomo para cada folha (0,335 nm), produz o grafite [3] numa forma alotrópica natural, onde atuam forças de Van der Waals. Há ainda outros alótropos sintéticos como os fulerenos e os nanotubos de carbono.

Faremos aqui uma apresentação do que diversos textos e pesquisas apontam sobre a estrutura e as características principais do grafeno. Definiremos a estrutura básica da monocamada e seus espectros de energia, estendendo características relevantes e suas diferenças para a bicamada de grafeno.

A partir disso, estabeleceremos os fundamentos que conduziram o trabalho de Jackiw-Pi sobre a persistência dos modos zero de Dirac na bicamada de grafeno [7], submetidos a um campo de calibre, que resultaram no modelo que analisamos neste trabalho - um par de EDOs lineares de primeira ordem acopladas. Para tanto, é considerado como ponto de partida, a equação de Dirac para a mecânica quântica relativística, proposta em 1928 [17]. Na sequência são derivados os hamiltonianos da monocamada, posteriormente estendidos para a bicamada de grafeno.

O procedimento envolve a análise dos espinores de Dirac a partir do estudo das interações entre parceiros de dimerização de uma rede cristalina, estendido para o grafeno de acordo com [12], correspondendo às distorções de Kekulé¹ (análogo das estruturas de Lewis). Verifica-se aí que o campo efetivo de Dirac interage com um campo escalar homogêneo e que há um campo escalar $\phi(r)$ acoplado ao campo de Fermi, resultando na descrição em termos do hamiltoniano. Sujeitando o sistema a um campo externo como parâmetro de controle e aplicando um campo de calibre de Dirac, tem-se um hamiltoniano efetivo para o caso, o que será estendido para o caso da bicamada.

Sob condições de autoestados de energia zero de Dirac, são calculadas equações de autovalores, resultando nas duas EDOs lineares de primeira ordem acopladas, que constituem-se no modelo de Jackiw-Pi, objeto de nossa discussão.

¹ Kekulé desenvolveu um modelo de anéis aromáticos, que considera que as ligações entre monômeros de um anel consistem de um híbrido de ligações simples e dupla, sendo idênticas todas as ligações no anel. Os modos de ressonância do sistema da forma híbrida, são resultantes de um estado normalizado das combinações mais prováveis.

1.1 ESTRUTURA BÁSICAS DO GRAFENO

O grafeno caracteriza-se por ser uma rede cristalina composta por seis átomos de carbono que formam sua estrutura fundamental, no formato de um favo de mel, constituindo a primeira zona de Brillouin do espaço recíproco [18]. A configuração geométrica é dada por ligações que geram uma forma hexagonal planar, Fig. 1.1, cujo centro corresponde ao ponto Γ . Os pontos K e K' , que se repetem alternativamente em cada vértice da estrutura fundamental, encontram-se nas posições dos sítios atômicos de alta simetria do espaço de *momentum*, na primeira zona de Brillouin, e são chamados de pontos de Dirac [19, 20].

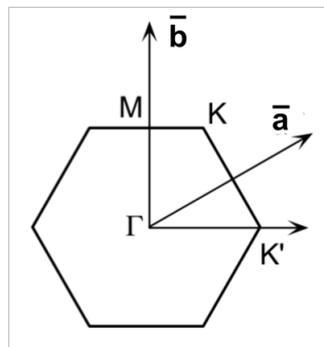


Figura 1.1 – Estrutura fundamental do grafeno - primeira zona de Brillouin da rede recíproca. Adaptado de [19].

Estes pontos K e K' , na Fig. 1.1, presentes em toda a rede, são definidos por vetores da rede recíproca, tais que

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right), \quad (1.1a)$$

$$\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{3}\hat{x} \right). \quad (1.1b)$$

Os vetores $\bar{\mathbf{a}}$ e $\bar{\mathbf{b}}$, na Fig. 1.1, são vetores primitivos da rede recíproca e definem a i -ésima zona de Brillouin da rede, centrada em Γ , sendo dados por

$$\bar{\mathbf{a}} = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right), \quad (1.2a)$$

$$\bar{\mathbf{b}} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{y} \right), \quad (1.2b)$$

onde \hat{x} e \hat{y} são vetores unitário dos eixos x e y , respectivamente, conforme Fig. 1.2b. O valor $a \simeq 2,46 \text{ \AA}$ é a distância entre cada átomo de uma mesma sub-rede (A, B), descrita a seguir, sendo \AA o símbolo para *ångström*, cuja unidade equivale a $10^{-10}m$. A distância entre os átomos vale $a/\sqrt{3} \simeq 1,42 \text{ \AA}$.

A estrutura de rede é composta por uma célula unitária que contém dois átomos nomeados A e B . Cada átomo da rede é conectado por duas ligações simples e uma ligação dupla, chamadas de ligações sigma (σ), vide Fig. 1.2a, as quais estruturam a rede bidimensionalmente [10] como uma folha. A célula unitária não é recíproca com uma única rede de Bravais e por esta razão, são consideradas duas redes de Bravais triangulares intercaladas pelos átomos A e B da base [20], definindo duas sub-redes de átomos A e B , conforme Fig. 1.2b.

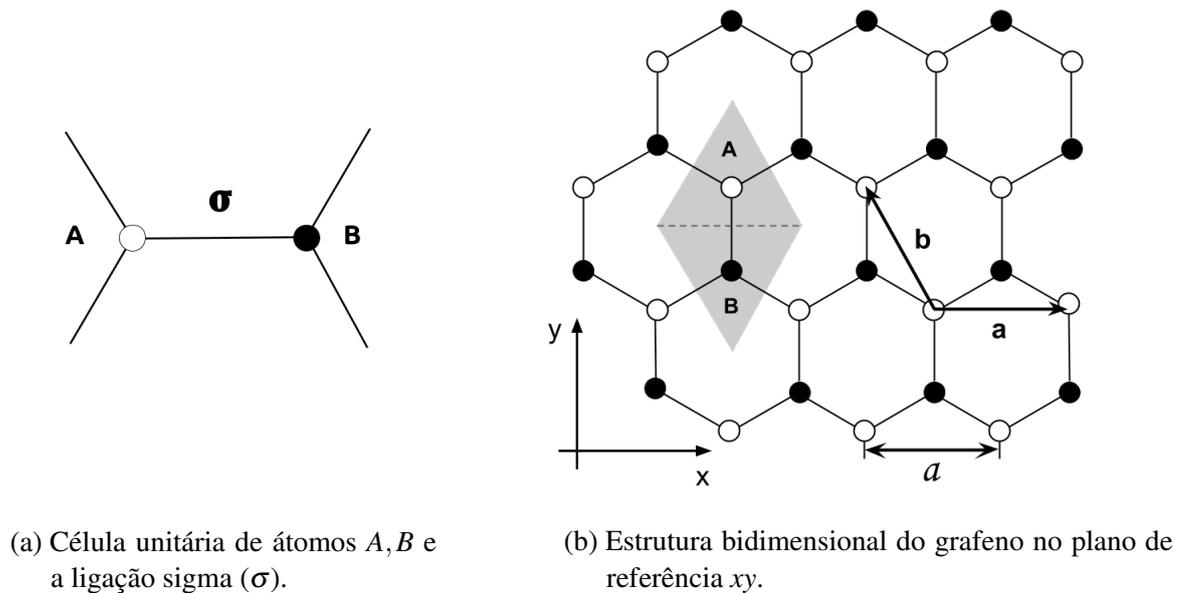


Figura 1.2 – (a) Célula unitária de átomos A, B e a ligação sigma (σ).
 (b) Estrutura bidimensional do grafeno no plano de referência xy . Vetores primitivos de translação \mathbf{a} , \mathbf{b} . Sub-rede A, B . Distância a entre átomos da mesma sub-rede.

Os vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} da Fig. 1.2b, são vetores primitivos de translação da rede. Estes vetores são a base para a construção de toda a rede cristalina [10], sendo dados por

$$\mathbf{a} = a\hat{x}, \quad (1.3a)$$

$$\mathbf{b} = \frac{a}{2} \left(-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y} \right). \quad (1.3b)$$

Os vetores que conectam o átomo B aos vizinhos próximos A , conforme Fig. 1.3, são dados por

τ_l ($l = 1, 2, 3$), de acordo com

$$\tau_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{y}, \quad (1.4a)$$

$$\tau_2 = \frac{a}{2} \left(-\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right), \quad (1.4b)$$

$$\tau_3 = \frac{a}{2} \left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right). \quad (1.4c)$$

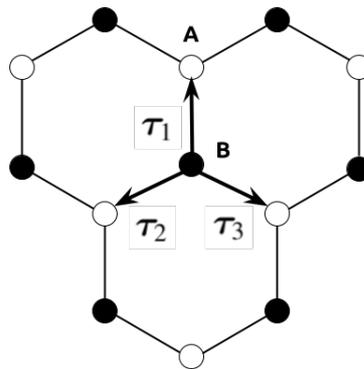


Figura 1.3 – Vetores primitivos que conectam os átomos B aos vizinhos próximos A .

Com isso, podemos definir as sub-redes (A, B) a partir das redes diretas \mathbf{R}_A e \mathbf{R}_B como uma combinação linear dos vetores de translação da Eq. (1.3), de maneira que

$$\mathbf{R}_A = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b} + \tau_l, \quad (1.5a)$$

$$\mathbf{R}_B = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b}, \quad (1.5b)$$

onde o n -ésimo átomo da sub-rede (A, B) é especificado por números inteiros n_a e n_b .

1.2 DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA

Um átomo típico de carbono possui seis elétrons na eletrosfera distribuídos da seguinte forma: dois elétrons ocupam o nível 1 (camada K), com o subnível $1s$ preenchido; nível 2 (camada L), com subnível $2s$ preenchido e subnível $2p$ com somente dois elétrons, dentre as seis ocupações possíveis [21]. As ligações entre os átomos da rede são chamadas de ligação-sigma (σ), que no estado ideal ocorrem no plano xy , vide Fig. 1.2b. O conjunto de ligações σ

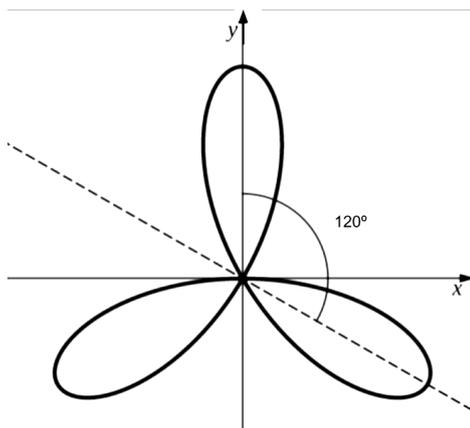
que forma um hexágono, determina um plano designado por plano- σ_i , onde $i = \{1, 2, 3, \dots, n\}$ é a i -ésima zona de Brillouin [19].

A distribuição eletrônica \mathcal{D}_0 do estado fundamental do carbono tem a configuração $\mathcal{D}_0 = 1s^2 2s^2 2p^2$. O subnível p possui três orbitais, sendo $p = p_x, p_y, p_z$. Com isso, reescrevemos a configuração fundamental como $\mathcal{D}_0 = 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$. As ligações do plano- σ_i ocorrem somente na camada L por um processo chamado hibridização (ou hibridação), em que o subnível s associa-se com o subnível p , na forma sp^3 . Mais especificamente, a hibridização se conforma em sp_{xy}^3 , onde o elétron remanescente do processo passa a ocupar o orbital p_z [21].

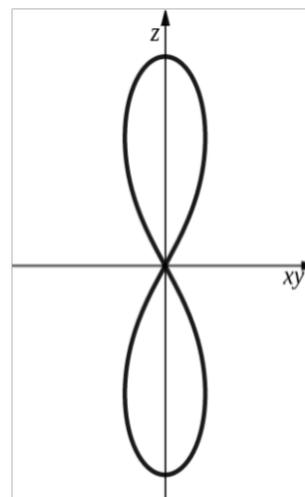
O orbital p_z fica orientando verticalmente em relação ao plano- σ_i [22]. A grosso modo, pode-se dizer que, pela excitação eletrônica, um dos elétrons do orbital $2s^2$ passou a ocupar o orbital $2p_z$ pela dinâmica do princípio da exclusão de Pauli. A distribuição hibridizada \mathcal{D}_h é dada então por

$$\mathcal{D}_0 = 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0 \rightarrow \mathcal{D}_h = 1s^2 2sp_{xy}^3 2p_z^1, \quad (1.6)$$

onde o índice h indica a configuração híbrida. O plano- σ_i de ligações conforma a hibridização sp_{xy}^3 numa disposição geométrica trigonal plana, conforme Fig. 1.4a. A nuvem eletrônica de ocupação do orbital p_z , numa representação que corresponde a uma perpendicular ao plano da Fig. 1.4a, é dado na Fig. 1.4b.



(a) Hibridização sp_{xy}^3 no plano xy .



(b) Orbital $2p_z^1$, perpendicular ao plano xy .

Figura 1.4 – (a) Disposição geométrica no plano xy da hibridização do carbono na forma sp_{xy}^3 , visualizado a partir do eixo z . (b) Nuvem de probabilidade do orbital p_z .

O elétron do orbital p_z é dito como deslocalizado e isto se estende por toda a rede, sem a preferência de um estado de ligação π ($+z$) ou não-ligado $\bar{\pi}$ ($-z$), como na Fig. 1.5, onde z é o eixo perpendicular ao plano xy , que também corresponde a orientação do plano- σ_i , conforme a Fig. 1.4b.

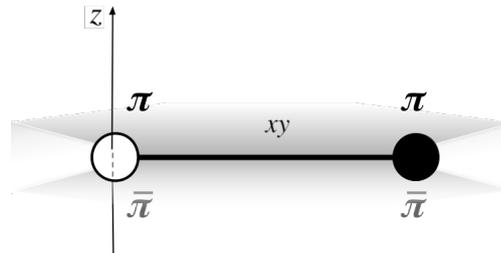


Figura 1.5 – Elétrons π ($+z$) e $\bar{\pi}$ ($-z$) dos átomos A e B.

As ondas que descrevem os orbitais não-ligantes e ligantes correspondem a um estado fundamental específico dessa configuração híbrida de orbitais sp_{xy}^3 com estados de ligação em p_z^1 num cristal, sendo caracterizadas pelo momento de Bloch [21, 23]. Com isso, observa-se que o próprio orbital p_z hibridiza-se formando duas bandas semipreenchidas de ligações de elétrons livres π para banda de condução e $\bar{\pi}$ para banda de valência. Desta forma, o conjunto de orbitais $p_{z\pm}$ possui densidade $N/2$ portadores de carga nesta configuração, sendo N equivalente ao número de átomos presentes na rede [24]. O orbital $p_{z\pm}$ possui dois estados de spins, com os N elétrons ocupando os estados de menor energia. Como N é muito elevado, formam-se duas bandas quase-contínuas [25].

1.3 FUNÇÕES DE ONDA E ESPECTRO DE ENERGIA

A primeira zona de Brillouin possui estados de elétrons livres que se repetem no espaço recíproco. Estes estados podem ser descritos pelas funções de onda de Bloch, ou estados de Bloch [23, 26]. Seja $\psi(\mathbf{r})$ o estado de Bloch dos elétrons livres de um átomo em uma dada posição \mathbf{r} da rede, com vetor de onda \mathbf{k} , temos que

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

onde $u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ tem mesma periodicidade da rede, para \mathbf{R} um vetor da rede recíproca. De acordo com [19], fazendo $\omega = 2\pi i/3$, para os pontos K e K' valem as relações entre os vetores

das Eqs. (1.1) e (1.4), de modo que para K , temos

$$\exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_1) = \omega, \quad (1.8a)$$

$$\exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = \omega^{-1}, \quad (1.8b)$$

$$\exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_3) = 1, \quad (1.8c)$$

e para K' ,

$$\exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_1) = 1, \quad (1.9a)$$

$$\exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = \omega^{-1}, \quad (1.9b)$$

$$\exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_3) = \omega. \quad (1.9c)$$

O conjunto de vetores da rede recíproca devem obedecer o fato de que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \bar{\mathbf{a}}_i \cdot \bar{\mathbf{b}}_j = 2\pi\delta_{ij}$, onde o símbolo δ é a delta de Kronecker, com $i, j = \{1, 2\}$, sendo

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (1.10)$$

As relações das Eqs. (1.8) e (1.9) conduzem à Eq. (1.17), que definirá o comportamento em torno do ponto K ou K' , arbitrariamente.

As bandas de condução e valência dos estados $\bar{\pi}$ e π tocam nos pontos K e K' na região do nível de Fermi. Com isso, as propriedades eletrônicas são determinadas pelos estados próximos aos pontos K e K' . No modelo *tight-binding* (do inglês, ligação forte), as funções de onda são escritas como

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \zeta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \zeta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B), \quad (1.11)$$

onde $\zeta(\mathbf{r})$ é a função de onda do orbital p_z do átomo de carbono localizado na origem. De acordo com [19], seja γ_0 a função de transferência entre átomos vizinhos para a origem do orbital p_z e ε o autovalor da energia, temos

$$\varepsilon \psi_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l), \quad (1.12a)$$

$$\varepsilon \psi_B(\mathbf{R}_B) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\mathbf{R}_B + \boldsymbol{\tau}_l). \quad (1.12b)$$

A integral de sobreposição entre os sítios A e B próximos é desprezada por simplificação. Desta forma, assumindo a correspondência com o vetor de onda \mathbf{k} , tal que

$$\psi(\mathbf{R}_A) \propto f_A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A), \quad (1.13a)$$

$$\psi(\mathbf{R}_B) \propto f_B(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B), \quad (1.13b)$$

onde $f_A(\mathbf{k})$ e $f_B(\mathbf{k})$ determinam a matriz de transferência, temos,

$$\begin{pmatrix} 0 & h_{AB}(\mathbf{k}) \\ h_{AB}^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

onde

$$h_{AB}(\mathbf{k}) = -\gamma_0 \sum_l \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l). \quad (1.15)$$

Solucionando o autovalor ε , definimos a estrutura da banda $\pi, \bar{\pi}$ do grafeno conforme o modelo *tight-binding* em relação aos vizinhos próximo, de modo que

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ak_x}{2}\right)}, \quad (1.16)$$

onde k_x e k_y são componentes escalares do vetor de onda \mathbf{k} nas direções \hat{x} e \hat{y} , respectivamente. A distribuição de energias de banda dos pontos K , K' , Γ e M são exibidas conforme gráfico da Fig. 1.6.

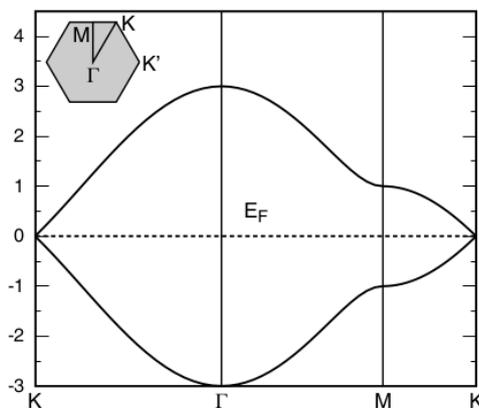


Figura 1.6 – Estrutura da banda $\pi, \bar{\pi}$ do grafeno do modelo *tight-binding*, apresentando *gap* nulo nos pontos K e K' . Os valores acessíveis de ε ficam contidos na região interna do gráfico, onde o nível de Fermi (E_F) está no centro $\varepsilon = 0$.

Substituindo \mathbf{k} por $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ e usando as relações das Eqs. (1.8) e (1.9) bem como a identidade de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$, podemos obter

$$-\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp[-i(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau}_l] = -i\omega^{-1} \gamma(k_x - ik_y), \quad (1.17)$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2},$$

determinando o comportamento da estrutura de banda próximo do ponto K e K' . Conforme já mencionado, é arbitrário realizar os cálculos para o ponto K ou K' uma vez que $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{K}) = \varepsilon_{\pm}(\mathbf{K}') = 0$.

Obtendo as relações em termos da matriz de Pauli, fazemos

$$\gamma(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k})f(\mathbf{k}) = \varepsilon f(\mathbf{k}),$$

$$f(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (1.18)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$. Para o ponto K' temos a mesma expressão, à exceção de substituir $\boldsymbol{\sigma}$ pelo conjugado $\boldsymbol{\sigma}^*$. Desta forma, temos que a energia em torno dos pontos K e K' , como regiões de alta simetria², são equivalentes. Além disso, o estado de spin completa a descrição, de modo que

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \gamma \mathbf{s} \cdot \mathbf{k}, \quad (\mathbf{s} = \pm 1\hat{z}). \quad (1.19)$$

onde \hat{z} é o vetor unitário na direção z . Analogamente, a descrição quântica estabelece os operadores $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ e $\mathbf{k} = -i\nabla$, o que nos conduz a

$$\hat{\varepsilon}\psi(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar\gamma}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π .

A sobreposição nos pontos K e K' , conforme Fig. 1.7, forma uma secção cônica – os pontos de Dirac. A lacuna (do inglês *gap*) de energia é permitida somente nestes pontos, sendo nula entre as bandas.

² Compreende-se aqui, que o termo "alta simetria" se refere a condição da região apresentar características muito próximas de uma condição ideal, dado que a modelagem de certos sistemas físico são, por muitas vezes, idealizadas, mesmo o sistema apresente uma fraca correlação com a simetria analisada.

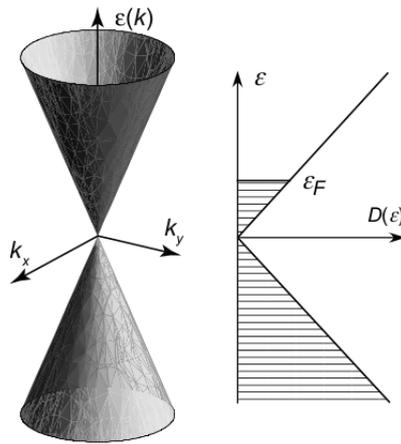


Figura 1.7 – Energia das bandas próxima dos pontos K e K' , onde ε_F é a energia de Fermi. O nível $D(\varepsilon = 0)$ representa o ponto de Dirac. O cone invertido apresenta o perfil de *vortex* e *gap* nulo para a massa[19]. As bandas de valência e condução se tocam no plano xy , no vértice dos cones.

Com isso, o topo da banda de valência corresponde à base da banda de condução. A excitação de elétrons da banda de valência para a banda de condução ocorre sem custo de energia, caracterizando o grafeno como um semimetal, Fig. 1.7. Isto resulta no deslocamento de elétrons com velocidade de Fermi v_F . Cada elétron $\pi, \bar{\pi}$ encontra-se no estado fundamental na banda de valência, com energia correspondente à massa de repouso m_0 .

Quando há diversos padrões de dimerização, os campos efetivos de Dirac também interagem com um campo escalar homogêneo na forma de um parâmetro de ordem, o que dá origem a uma lacuna no espectro de Dirac [12]. Para o campo escalar de perfil topológico, como um vórtice com estado de energia nulo por exemplo, há possibilidade de ocorrência de carga fracionária.

Na aproximação das duas redes, ao formar a sub-rede triangular (A, B), surge um vínculo rígido onde estão presentes os dois pontos de Dirac, conforme Figs. 1.7 e 1.8.

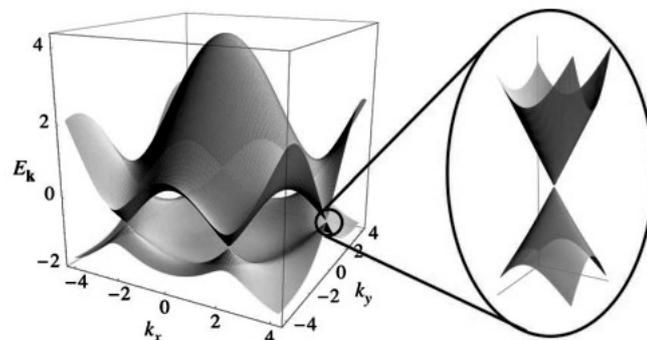


Figura 1.8 – Pontos de Dirac - região ampliada em K ou K' – da primeira zona de Brillouin. Adaptado de [27].

Esta estrutura eletrônica não convencional do grafeno foi prevista pela primeira vez teórica-

mente por Wallace em 1947 [28]. Isto equivale ao que é observado para férmions sem massa na equação relativística de Dirac, correspondente a equação de Weyl para neutrinos [29].

A expressão da energia cinética relativística para partículas em movimento é dada por

$$E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + (|\mathbf{p}|c)^2}. \quad (1.21)$$

Os portadores são férmions de Dirac com energia no nível de Fermi, onde é válida a velocidade de Fermi v_F , em que as expressões das Eq. (1.21) e (1.22) para energia cinética são semelhantes. Logo, a relação da Eq.(1.21) pode ser escrita como

$$E = \sqrt{E_0^2 + (v_F|\mathbf{p}|)^2}. \quad (1.22)$$

Na vizinhança dos pontos K e K' , o espectro eletrônico é de baixas energias e a relação de dispersão é linear [30], conforme Fig. 1.7. A energia de repouso E_0 é nula e a velocidade das partículas cresce linearmente com a energia de Fermi. Sabendo que $p = \hbar k$, a energia em termos do vetor de onda é dada por

$$E(k) = \pm \hbar v_F k, \quad (1.23)$$

onde os elétrons na banda de condução tem comportamento $+v_F$ e na banda de valência $-v_F$. Para a descrição da energia em termos dos operadores quânticos, segue que

$$\hat{\epsilon}\psi(\mathbf{r}) = \pm i\hbar v_F \nabla \psi(\mathbf{r}), \quad (1.24)$$

que exibe semelhança com a Eq. (1.20). Para os estados eletrônicos das excitações de baixa energia, o que se conclui, de acordo com estes últimos aspectos e conforme [19, 24, 29–31], é que as partículas que estão nas regiões dos pontos de Dirac (K , K') são partículas com comportamento semelhante ao de fótons. São caracterizadas por um *momentum* p mas destituídas de massa, movendo-se com velocidade fixa v_F , independentemente da energia. Como o fóton preserva a dependência linear na relação de Einstein, isto é coerente com o espectro eletrônico exibido na Fig. 1.7.

De acordo com [10, 12, 19, 24, 27, 32], os férmions de Dirac presentes na rede, embora se movam com v_F da ordem de $1/300$ da velocidade da luz, possuem efeitos relativísticos observáveis. A dispersão de energia apresentada na Fig. 1.7 é de característica válida unicamente em

baixas energias, apresentando comportamento físico semelhante a um sistema eletrodinâmico quântico (QED, do inglês, *quantum electrodynamics*) para férmions sem massa, exceto pelo fato de que, no grafeno, os férmions de Dirac movem-se com a velocidade de Fermi ($v_F < c$). São propriedades incomuns da QED que podem ser exibidas, mesmo em velocidades bastante inferiores a da luz [31]. De acordo com [3, 23, 24], são amplos os potenciais de estudo sobre este material.

1.4 A BICAMADA DE GRAFENO

A bicamada possui características distintas da monocamada. Empilhamentos que excedem a camada dupla também se comportam distintamente, tornando a bicamada um material único. Não se sabe exatamente como a sobreposição impõe a interação dos orbitais π no processo de dimerização³ [11]. Contudo, sabe-se que os potenciais atuam na forma de secções cônicas da zona de Brillouin, de modo geral semelhante à monocamada, justificando também a presença de elétrons sem massa (férmions de Dirac) [10, 33].

Para a bicamada de grafeno, há dois modos típicos de sobreposição de monocamadas paralelas, na forma de folhas. Nestes dois modos, a separação é dada por uma distância de equilíbrio da ordem do tamanho de um átomo de carbono, envolvendo interações de van der Waals, com energia entre 15 a 20 eV [34].

Os modos típicos de empilhamento são do tipo AB e AA. No empilhamento do tipo AA, as duas folhas estão empilhadas simetricamente, Fig. 1.9a, de modo que cada átomo da estrutura pertencente a uma das folhas está diretamente sobreposto verticalmente por um átomo da outra folha. O modelo de Jackiw-Pi é baseado no empilhamento do tipo AB, Fig. 1.9b, onde a geometria formada considera cada átomo de uma camada posicionado no centro Γ (primeira zona de Brillouin) da camada oposta, determinando uma nova rede de Bravais para a estrutura, conforme Fig. 1.10a, diferentemente do modo AA. Isto determina uma nova célula unitária [10]. Neste formato AB, o plano de Bragg tende a ser reduzido ao menor nível para análise de difração.

De acordo com [30], a energia de Fermi para o grafeno ideal⁴ corresponde ao ponto de Dirac, com dispersão linear para 1 eV. A Fig. 1.10b exhibe o espectro desta dispersão para a primeira zona de Brillouin, com uma ampliação do quadro na vizinhança do ponto K . Os pontos K e K' preservam relação de simetria, tal como a monocamada.

³ Entende-se por dimerização a ação de unir duas unidades moleculares idênticas. Um exemplo é a união de duas formas hexagonais unitárias do grafeno.

⁴ Entende-se ideal o material ausente de impurezas, deformações ou forças de campo externo.

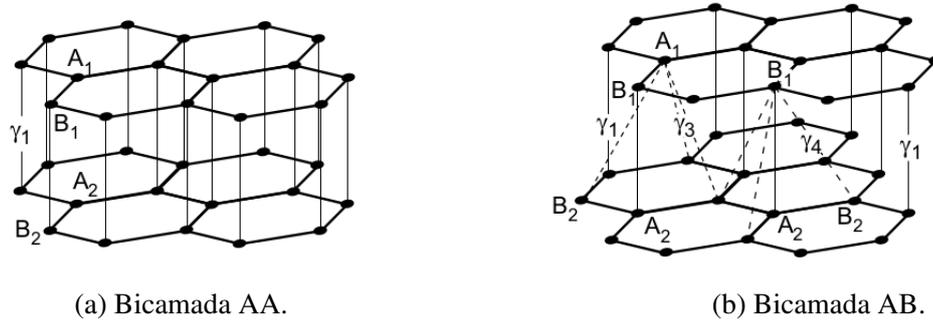
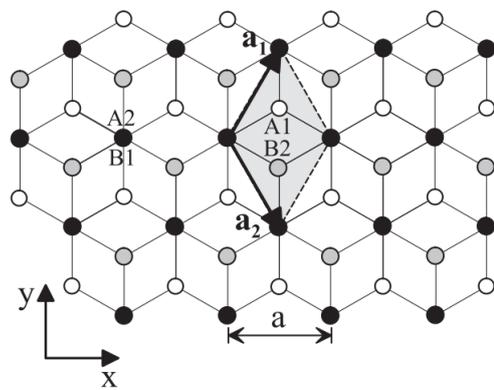
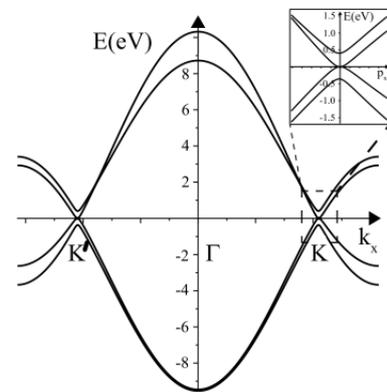


Figura 1.9 – (a) Bicamada AA. (b) Bicamada AB. [19].



(a) Bicamada de grafeno: sobreposição das sub-redes A e B.



(b) Espectro de energia em torno dos pontos K e K' .

Figura 1.10 – (a) Bicamada de grafeno: sobreposição das sub-redes A e B. [31]. (b) Espectro de energia em torno dos pontos K e K' . Adaptada de [31]

1.5 MODELO DE DIRAC CALIBRADO

Excitações de baixa energia em bicamada de grafeno exibem modos de energia e *gap* nulos para o espectro de Dirac em um parâmetro de ordem escalar que assume um perfil de vórtice, dada pela forma espacial do espinor de Dirac.

Jackiw e Pi [7] mostraram que esses modos persistem dinamicamente quando submetidos a um campo de calibre, o que torna finita a energia do vórtice. O efeito do campo de calibre na função de onda de energia nula é deslocar a fase atenuada do componente oscilatório da função de onda, presente quando não há o campo de calibre.

G.W. Semenoff demonstrou [35], a partir de um trabalho realizado em 1984, a conexão entre a teoria de bandas de uma monocamada do grafeno com a teoria de férmions de Dirac em (1+2)

dimensões, sendo uma dimensão temporal e duas espaciais. Com isso, pelo modelo relativístico da mecânica quântica, proposto por Paul Dirac em 1928 [17], temos

$$H\psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_0 c^2) \psi, \quad (1.25)$$

em que o produto $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ corresponde a um termo cinéticos e $\beta m_0 c^2$ a energia de repouso das partículas do sistema. Os símbolos $\boldsymbol{\alpha}$ e β designam matrizes, que descreveremos em breve.

Ocorrendo a dimerização, que chamamos de distorção de Kekulé, o campo hamiltoniano efetivo de Dirac h interage com um campo escalar $\phi(r)$, conforme [27]. A homogeneidade do campo escalar $\phi(r)$ com a massa $m_0 \rightarrow m$ é exibida de acordo o perfil de *vortex*, conforme Fig. 1.7, com *gap* nulo para a massa. Com isso, um hamiltoniano h que descreve essa interação em uma monocamada de grafeno é tal que h , dado por uma matriz hamiltoniana do modelo quaterniônico [36, 37], é expresso por

$$h_1 = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta |\phi| e^{-i\gamma\chi}, \quad (1.26)$$

onde $\boldsymbol{\alpha}$, β e γ são matrizes de Dirac 4×4 , de uma álgebra de Clifford $Cl_{1,3}(\mathbb{R})$ [38], onde \mathbb{R} é o conjunto dos números reais, dadas por

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é uma matriz de Pauli 2×2 , conforme [39], e corresponde a operadores auto-adjuntos [40], tal que

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.28)$$

onde $\sigma_x = \sigma_1$, $\sigma_y = \sigma_2$ e $\sigma_z = \sigma_3$. O símbolo \mathbf{p} é o operador *momentum*, dado por

$$\mathbf{p} = -i\nabla. \quad (1.29)$$

No produto $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, temos

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \sum_k^3 \sigma_k p_k = \begin{pmatrix} p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & -p_3 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

\mathbf{I} é uma matriz identidade dada por $\mathbf{I}_n = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$ e $\mathbf{0}$ é uma matriz nula, ambas matrizes 2×2 . O campo escalar $\phi(r)$ que interage com o hamiltoniano h_1 é dado por

$$\phi(r) = |\phi(r)|e^{i\chi}, \quad (1.31)$$

onde χ é um parâmetro numérico relativo ao volume de suscetibilidade magnética [41, 42, 32].

A matriz hamiltoniana h_1 é uma matriz 4×4 e atua sobre um espinor quádruplo Ψ , de modo que

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+^B \\ \psi_+^A \\ \psi_-^B \\ \psi_-^A \end{pmatrix}, \quad (1.32)$$

onde (\pm) referem-se aos dois pontos de Dirac e (A,B) referem-se às sub-redes. O hamiltoniano h_1 da Eq. (1.26) não é comutativo com α_3 . Com isso,

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha_3 h_1 \alpha_3 = -h_1. \quad (1.33)$$

Isto significa que α_3 mapeia soluções de energia positiva em soluções de energia negativa, onde os modos zero correspondem a automodos. Esta simetria de reflexão de energia é uma manifestação característica da simetria da sub-rede.

Jackiw-Pi avaliaram [7] a persistência destes modos zero para a bicamada submetendo o modelo de Dirac a um campo de calibre, dado por \mathbf{A} , produzindo um desacoplamento dos vórtices. Aplicando inicialmente o campo de calibre sobre a monocamada, o hamiltoniano da Eq. (1.26) torna-se

$$h_1^A = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \gamma \mathbf{A}) + \beta |\phi| e^{-i\gamma\chi}, \quad (1.34)$$

onde o índice sobrescrito A denota a aplicação do campo de calibre \mathbf{A} . O modelo de calibre possui simetria e calibre quirais, tal que

$$\phi(r) \rightarrow e^{2iv_F k} \phi(r), \quad (1.35a)$$

$$\Psi \rightarrow e^{i\gamma v_F k} \Psi, \quad (1.35b)$$

$$\chi \rightarrow \chi + v_F k, \quad (1.35c)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + v_F \nabla \mathbf{k}, \quad (1.35d)$$

onde o vetor de onda \mathbf{k} preserva as relações periódicas dos componentes da rede recíproca, devendo ser quiral para todos os domínios de ação do modelo de calibre.

De acordo com [11], a bicamada de grafeno é um material passível de ser produzido em laboratório. Sendo separada por uma barreira dielétrica e polarizada por uma tensão constante externa V , como parâmetro de controle, estabiliza-se a ação dos espinores da Eq. (1.32) ao adicionar linearmente o termo γV , originalmente dado pelo hamiltoniano h_1 da Eq. (1.26), sobre o qual foi aplicado o campo de calibre, resultando no hamiltoniano h_1^A da Eq. (1.34). Com isso, por uma aproximação de campo médio, o hamiltoniano para o sistema de bicamada, indicado por h_2 , é dado por

$$h_2 = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \gamma \mathbf{A}) + \beta |\phi| e^{-i\gamma \chi} + \gamma V, \quad (1.36)$$

o qual atua no espinor,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1^B \\ -\psi_1^A \\ \psi_2^B \\ \psi_2^A \end{pmatrix}. \quad (1.37)$$

A descrição deste espinor se refere a um único ponto de Dirac, K ou K' , onde (1,2) rotulam as duas camadas alinhadas. A presença do termo γV em h_2 , sem análogo em h_1 , perturba a simetria da reflexão de energia descrita pela Eq. (1.33). Entretanto, as propriedades de β sobre h_2 garantem um comportamento semelhante. Com isso, verifica-se que h_2 satisfaz a condição de

$$\beta \alpha_2 h_2^* \beta \alpha_2 = h_2, \quad (1.38)$$

onde α_2 é análogo a α_3 . Desta forma, a reflexão de energia atua como

$$\Psi_{-E} = \beta \alpha_2 \Psi_E^*, \quad (1.39)$$

onde h_2 possui estados próprios de energia zero, satisfazendo com isso a condição de

$$\alpha_2 \beta \Psi_0 = \Psi_0^*. \quad (1.40)$$

As transformações de calibre seguem a Eq. (1.35), sendo que V é um invariante de calibre. A nova propriedade de reflexão de energia, dadas as Eqs. (1.38) e (1.39), são preservadas. A consequência disso é a determinação dos modos zero, o que resulta no modelo de Jackiw-Pi, que apresentaremos a seguir.

1.6 O MODELO DE JACKIW-PI

O espinor quádruplo da Eq. (1.32) passa a ser apresentado em termos de dois espinores, dados por

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \Psi_1 = \begin{pmatrix} \psi_1^B \\ -\psi_1^A \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} \psi_2^B \\ \psi_2^A \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

A parti daí, são obtidas duas equações de autovalores que satisfazem os autoestados de energia zero, os quais devem estar presentes no hamiltoniano h_2 , Eq. (1.36). A partir das matrizes de Dirac, os espinores de energia zero são satisfeitos de acordo com a Eq. (1.40). Isto significa que temos $\Psi_2 = \sigma_2 \Psi_1^*$ e a equação de autovalor é tal que

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A}) + V] \Psi_1 + \phi(r) \sigma_2 \Psi_1^* = 0, \quad (1.42a)$$

$$\phi^*(r) \Psi_1 - [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A}) + V] \sigma_2 \Psi_1^* = 0, \quad (1.42b)$$

onde a segunda equação é uma consequência da primeira, não devendo ser consideradas separadamente. Esta Eq. (1.42), corresponde a uma matriz 2×1 . Buscando a redução desta matriz, define-se

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F(\mathbf{r}) \\ G(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.43)$$

onde as funções $F(\mathbf{r})$ e $G(\mathbf{r})$ postulam o *Ansatz*, conforme Eq. (1.45). Reescrevendo a Eq. (1.42) em termos da componente angular θ , tal que

$$VG - ie^{i\theta} \left[\partial_+ + \frac{n}{r} A \right] F + ime^{in\theta} F^* = 0, \quad (1.44a)$$

$$VF - ie^{-i\theta} \left[\partial_- - \frac{n}{r} A \right] G - ime^{i\theta} G^* = 0, \quad (1.44b)$$

para $\partial_{\pm} \equiv \frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$, onde temos que $A^i = -n\mathcal{E}^{ij} \frac{r^j}{r^2} A(r)$, com $A(0) = 0$, $A(\infty) = \frac{1}{2}$ e $\phi(r) = m(r)e^{in\theta}$, com $m(0) = 0$ e $m(\infty) = m$.

Separando a dependência angular em θ para tornar a Eq. (1.44) real e mais simples, Jackiw-Pi postulam o *Ansatz*

$$F(\mathbf{r}) = -i \frac{f(r)}{\sqrt{r}} e^{[M(\mathbf{r}) - il_1 \theta]}, \quad (1.45a)$$

$$G(\mathbf{r}) = \frac{g(r)}{\sqrt{r}} e^{[M(\mathbf{r}) - il_2 \theta]}, \quad (1.45b)$$

onde $l_1 = (n-1)/2$, $l_2 = (n+1)/2$, $M(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r})$, tornando as funções $f(r), g(r)$ reais, para n um inteiro ímpar. Isso conduz a Eq. (1.44) para

$$\left[\partial_r - \frac{n}{r} \left(\frac{1}{2} - A \right) \right] f - Vg = 0, \quad (1.46a)$$

$$\left[\partial_r + \frac{n}{r} \left(\frac{1}{2} - A \right) \right] g + Vf = 0. \quad (1.46b)$$

Enquanto A não for especificado, além das assíntotas, a equação (1.46) aparenta não ser explicitamente integrável, não podendo remover A como ocorre na monocamada. Contudo, pode-se mostrar que existe uma solução normalizável. Para $r \rightarrow \infty$, $A \rightarrow \frac{1}{2}$, a Eq. (1.46) reduz-se para

$$f' - Vg = 0, \quad (1.47a)$$

$$g' + Vf = 0, \quad (1.47b)$$

com solução que envolve duas constantes, (c,d), de modo que

$$f(r) = c \cos(Vr) + d \sin(Vr), \quad (1.48a)$$

$$g(r) = -c \sin(Vr) + d \cos(Vr). \quad (1.48b)$$

Dado que o fator $r^{-1/2}e^{-M(r)}$, tanto $F(\mathbf{r})$ quanto $G(\mathbf{r})$ decaem com um valor de r elevado. Com isso, a função de onda será válida, e normalizável, se uma solução regular na origem puder ser construída. Na origem, o termo A do campo de calibre desaparece e a Eq. (1.46) fica reduzida a

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{n}{2r}\right)f - Vg = 0, \quad (1.49a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{n}{2r}\right)g + Vf = 0. \quad (1.49b)$$

Estas são as mesmas para todo r na ausência do campo de calibre A. Ocorre da mesma forma com o hamiltoniano h_2 na Eq. (1.26). A solução desse par de Eq. (1.49) é dada em termos de funções de Bessel. Este *Ansatz* descreve a persistência de modos zero em um modelo de Dirac calibrado para a bicamada de grafeno.

Após [7] separar a dependência angular ao campo de calibre e definir o modelo da Eq. (1.49), a abordagem Ermakov-Lewis realizada por [13] para reduzir este par de EDOs lineares acopladas, resulta em

$$(D_r - \Phi(r))u(r) = Vv(r), \quad (1.50a)$$

$$(D_r + \Phi(r))v(r) = -Vu(r), \quad (1.50b)$$

cujos termos envolvem assumir os papéis da Eq. (1.49a), conforme

$$f(r) \rightarrow u(r), \quad (1.51a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{n}{2r}\right) \rightarrow (D_r - \Phi(r)), \quad (1.51b)$$

e da Eq. (1.49b), conforme

$$g(r) \rightarrow v(r), \quad (1.52a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{n}{2r}\right) \rightarrow (D_r + \Phi(r)), \quad (1.52b)$$

onde $D_r = d/dr$ e r é a coordenada radial. A função $\Phi = \Phi(r)$ é composta, dada por

$$\Phi(r) = \frac{k/2}{r} - k\frac{A(r)}{r}, \quad (1.53)$$

onde temos que $\phi(r)$ e $a(r)$ são dados por

$$\phi(r) = \frac{k/2}{r}, \quad (1.54a)$$

$$a(r) = k \frac{A(r)}{r}, \quad (1.54b)$$

onde k é um número inteiro positivo ímpar e representa o parâmetro de dimerização. Relembrando que $\phi(r)$ é o campo escalar que descreve a dimerização característica do sistema, conhecida como distorção de Kekulé. De acordo com [13], este campo escalar também pode ser caracterizado como a condensação que surge a partir dos estados de banda inter-camada, existente por forças de Coulomb entre as partículas de uma camada e lacunas da outra.

O que se observa, no lugar da equação de Dirac completa, foi um modelo reduzido representado pela Eq. (1.50). De acordo com [13], esse par de EDOs lineares de primeira ordem acopladas para as variáveis $u(r)$ e $v(r)$, correspondem a parceiros supersimétricos previstos na mecânica quântica supersimétrica. A investigação de soluções aproximadas do modelo de Jackiw-Pi foi feita apenas através de séries formais de potências, mais especificamente, por funções de Bessel modificadas.

Até aqui, realizamos uma descrição objetiva de algumas características fundamentais do grafeno. Dedicamos uma descrição mais detalhada para a monocamada e definimos a bicamada como um extensão desta, exibindo algumas diferenças características. Este breve estudo está longe de ser completo. Entretanto, algumas definições importantes foram apresentadas a fim de contextualizar e fundamentar o modelo de aplicação deste trabalho, levando em consideração o objetivo de desenvolver uma solução analítica para o modelo proposto por Jackiw-Pi para a bicamada de grafeno.

Diversas propriedades foram omitidas das discussões que traçamos. Os estudos analisados são uma extensão bastante aprimorada do que apresentamos. Tais aspectos podem ser analisados apropriadamente em maiores detalhes nas referências [19, 24, 31], entre outras. Uma outra característica a ser destacada e que tomaremos por encerrado o capítulo, diz respeito ao fracionamento de cargas estar intimamente relacionado à topologia do sistema [7, 12]. Em sistemas bidimensionais, este fracionamento existe em um efeito Hall quântico aprimorado [27, 32]. Se trata da simetria de reversão do tempo ser quebrada por um campo magnético externo elevado, tema este de pesquisas recentes. Alguns argumentos demonstram que existem excitações topológicas com carga fracionária em estruturas do tipo grafeno, onde as quasipartículas são descritas por dois tipos de férmions de Dirac, onde a simetria de reversão do tempo é respeitada. Mais detalhes em [27].

2 O HAMILTONIANO PARA O MODELO DE JACKIW-PI

Neste capítulo partimos da hipótese de haver alguma lei de conservação associada ao sistema descrito pelas equações de Jackiw-Pi. Através de uma substituição conveniente de variáveis aplicadas sobre as equações do modelo, reformuladas em [13] e apresentadas na seção 1.6, iremos obter um hamiltoniano não-trivial, dado o campo de calibre imposto a estas equações.

Sobre este hamiltoniano, identificado como hamiltoniano quadrático dada pela Eq. (2.6), iremos aplicar a transformada de Legendre inversa, nos retornando um lagrangiano também quadrático. A obtenção deste lagrangiano é o que nos permitirá construir o funcional da ação e aplicar posteriormente o método de simetrias de Noether. A justificativa para produção do lagrangiano é dado pelo fato de que funções de lagrangianos tem maior afinidade com o teorema de Noether.

Por fim, definimos a equação de Pinney, que está dentre um número limitado de equações diferenciais não-lineares que possuem solução exata, onde determinados resultados obtidos ao longo do trabalho são ajustados para o acoplamento nesta equação.

2.1 HAMILTONIANO DO SISTEMA

Fato pela hipótese que estabelecemos, de que há alguma lei de conservação associada ao modelo de Jackiw-Pi, é conveniente que façamos uma reformulação deste modelo. Desta forma, fazemos algumas substituições de variáveis convenientes à formulação hamiltoniana, empregando-as sobre as equações apresentadas por [13] e aqui representadas pelas Eqs. (1.50a) e (1.50b). Desta forma, sejam as variáveis,

$$u = q, \quad v = p, \quad r = \frac{t}{V}, \quad \phi(t) = \frac{\Phi(r)}{V}, \quad (2.1)$$

temos então, para as Eqs. (1.50a) e (1.50b), respectivamente,

$$\dot{q} = \phi(t)q + p, \quad (2.2a)$$

$$\dot{p} = -q - \phi(t)p. \quad (2.2b)$$

O ponto sobre as variáveis p e q denota derivada em relação à nova variável independente t , tal que

$$\dot{q} = \frac{dq}{dt}, \quad \dot{p} = \frac{dp}{dt}. \quad (2.3)$$

O que podemos perceber, pela primeira vez, com base nas Eqs. (2.2a) e (2.2b), é que as equações do modelo de Jackiw-Pi representam formalmente um sistema hamiltoniano, não trivial em razão do campo de calibre aplicado às Eqs. (1.50a) e (1.50b), de tal maneira que temos

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (2.4)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (2.5)$$

O sistema de EDOs acopladas do modelo de Jackiw-Pi, representadas pelas Eqs. (1.50a) e (1.50b) a partir da substituição de variáveis dadas na Eq. (2.1), é intrinsecamente dependente do tempo, definindo um OHDT.

Conforme [43], para um sistema de OHDT, a função hamiltoniano quadrático é explicitamente dependente do tempo e pode ser escrita como

$$H(q, p, t) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \phi(t)pq. \quad (2.6)$$

Para N dimensões, a forma do hamiltoniano da Eq. (2.6) é dada por $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, expressa por

$$H = \frac{1}{2}(|\mathbf{p}|^2 + |\mathbf{q}|^2) + \phi(t)\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}. \quad (2.7)$$

onde \mathbf{p} e \mathbf{q} são vetores N -dimensionais.

Para Sarlet [15], a existência de uma descrição hamiltoniana sugere um grande número de possibilidades. Dentre estas possibilidades, destaca-se a busca de constantes de movimento através do método de simetrias de Noether. A busca de simetrias infinitesimais do funcional da ação do presente caso, só pode ocorrer para certas formas da função $\phi(t)$. Estas formas são determinadas no Cap. 4.

2.2 TRANSFORMADA DE LEGENDRE INVERSA

A transformada de Legendre $\mathcal{J}(q, p, t)$ estabelece a equivalência entre os formalismos lagrangiano e hamiltoniano de um sistema [1]. Comumente, $\mathcal{J}(q, p, t)$ é aplicado sobre um dado lagrangiano $L = L(q, \dot{q}, t)$ afim de se obter um hamiltoniano $H = H(q, p, t)$.

Assim, seja $\mathcal{J}(q, p, t)$ a transformada de Legendre de H , definimos formalmente o lagrangiano $L(q, \dot{q}, t)$ a partir da transformada inversa de Legendre $\mathcal{J}^{-1}(q, \dot{q}, t)$. Desta forma, dado o hamiltoniano H , conforme Eq. (2.6), temos

$$H(q, p, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t). \quad (2.8)$$

Com isso, a partir da Eq. (2.4) para o caso unidimensional, podemos escrever

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \phi(t)pq \right), \quad (2.9)$$

cuja derivada em relação a p resulta em

$$\dot{q} = p + \phi(t)q. \quad (2.10)$$

Posteriormente, isolando a variável p do hamiltoniano, obtemos as variáveis de acordo com $L = L(q, \dot{q}, t)$. Conforme prevê a transformada de Legendre (inversa), temos

$$p = \dot{q} - \phi(t)q, \quad (2.11)$$

estando assim, \dot{q} e p em conformidade com as Eqs. (2.2a) e (2.2b), as quais descrevem a Eq. (1.50) para o modelo de Jackiw-Pi. Com isso, obteremos o lagrangiano contida no espaço formal que descreve o sistema e que contém suas variáveis de estado para o *Ansatz*, conforme veremos a seguir.

2.3 LAGRANGIANO DO SISTEMA

Embora não seja a única alternativa, o método de simetrias de Noether se expressa de maneira mais direta no formalismo lagrangiano. Desta forma, partimos da análise feita na seção (2.2) a

partir da equação (2.8), onde temos a relação de $H(q, p, t)$ dada na Eq. (2.7), o que deve resultar na obtenção de $L(q, \dot{q}, t)$ que pretendemos.

Este passo determinará o lagrangiano do sistema, cuja função define sua dinâmica. Não há que se falar num primeiro momento em coordenadas ou posições generalizadas do sistema (ou momentos generalizados no caso do hamiltoniano), uma vez que foi estabelecido um hamiltoniano não trivial a partir do *Ansatz* que mencionamos.

A partir da relação de Euler-Lagrange, Eq. (2.8), ao que se segue com a variável p pela Eq. (2.11), fazemos

$$\begin{aligned} L &= p\dot{q} - H \\ &= (\dot{q} - \phi(t)q)\dot{q} - \left(\frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \phi(t)pq \right). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Com isso obtemos o lagrangiano quadrático, onde $\phi = \phi(t)$, tal que

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{1}{2}(\dot{q}^2 - (1 - \phi^2)q^2) - \phi q\dot{q}. \quad (2.13)$$

Aplicando a equação de Euler-Lagrange, dada por

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (2.14)$$

sobre o lagrangiano obtido na Eq. (2.13), temos a equação de movimento

$$\ddot{q} + (1 - \phi^2 - \dot{\phi})q = 0. \quad (2.15)$$

Em termos do momento p , temos

$$\ddot{p} + (1 + \dot{\phi} - \phi^2)p = 0, \quad (2.16)$$

onde fazemos

$$\omega^2 = 1 - \phi^2 - \dot{\phi}. \quad (2.17)$$

Dessa forma, sabendo que $\phi = \phi(t)$, o perfil da Eq. (2.15) corresponde a um OHDT, com $\omega = \omega(t)$, valendo dizer também para Eq. (2.16) à exceção de uma diferença de $2\dot{\phi}$ na definição da frequência. Deste modo,

$$\ddot{q} + \omega^2(t)q = 0. \quad (2.18)$$

Com o lagrangiano $L(q, \dot{q}, t)$, definiremos o funcional da ação e verificaremos sua invariância (à exceção da adição de alguma constante) sob uma transformação puntual infinitesimal. Essa é a condição, a partir do teorema de Noether, para que esteja presente alguma lei de conservação associada e portanto, alguma lei de simetria.

2.4 A EQUAÇÃO DE PINNEY

De acordo com [14], há um número restrito de equações não-lineares que possuem solução exata. Dentre elas inclui-se, para $\rho = \rho(t)$ e $\dot{\rho} = d\rho/dt$, a equação

$$\ddot{\rho} + \omega^2(t)\rho = \frac{\kappa}{\rho^3}, \quad (2.19)$$

a qual chamamos de equação de Pinney, onde κ é uma constante arbitrária e $\omega(t)$ é a função que determina a frequência angular.

Eliminando a constante κ da Eq. (2.4) a partir de uma derivação simples em t , por

$$\frac{d}{dt} \left[\rho^3 \left(\ddot{\rho} + \omega^2(t)\rho \right) - \kappa \right] = 0, \quad (2.20)$$

obtemos, com $\omega = \omega(t)$, a equação

$$\rho \ddot{\rho} + 3\dot{\rho}\dot{\rho} + 4\omega^2\rho\dot{\rho} + 2\omega\dot{\omega}\rho^2 = 0. \quad (2.21)$$

A solução da Eq. (2.21) é desenvolvida fazendo $T = \rho^2$, de onde se obtém as derivadas

$$\dot{T} = 2\rho\dot{\rho} \quad (2.22a)$$

$$\dot{T} = 2\dot{\rho}^2 + 2\rho\ddot{\rho} \quad (2.22b)$$

$$\ddot{T} = 2\rho\ddot{\rho} + 6\dot{\rho}\ddot{\rho}. \quad (2.22c)$$

Adaptando a Eq. (2.22) à Eq. (2.21), obtemos

$$\frac{1}{2}\ddot{T} = \rho\ddot{\rho} + 3\dot{\rho}\ddot{\rho} \quad (2.23a)$$

$$2\omega\frac{d}{dt}(\omega T) = 2\omega\dot{\omega}T + 2\omega^2\dot{T} = 2\omega\dot{\omega}\rho^2 + 4\omega^2\rho\dot{\rho}, \quad (2.23b)$$

o que nos leva à

$$\ddot{T} + 4\omega^2\dot{T} + 4\omega\dot{\omega}T = 0. \quad (2.24)$$

De acordo com [44, 45], dadas as condições iniciais $\rho(t_0) = \rho_0 \neq 0$ e $\dot{\rho}(t_0) = \dot{\rho}_0$, temos que

$$\rho = (c_3g_1^2 + 2c_4g_1g_2 + c_5g_2^2)^{1/2}, \quad (2.25)$$

onde $c_3c_5 - c_4^2 = \kappa$ e $g_i = g_i(t)$, $i = \{1, 2\}$, é solução linearmente independente a partir da solução da equação linear ajustada como

$$\ddot{g}_i + \omega^2(t)g_i = 0, \quad (2.26)$$

A solução de Pinney, apresentada na Eq. (2.25), indica uma raiz em que t_0 deve retornar o valor ρ_0 para que a solução seja consistente. Esta solução contorna o problema de não-linearidade, característico de sistemas que envolvam o OHDT, apresentando-se como uma ferramenta chave para a obtenção de solução do par de equações dados pelas Eqs. (2.2a) e (2.2b).

Encerramos este capítulo tendo estabelecido um hamiltoniano mediante a hipótese de haver alguma lei de conservação associada ao modelo de Jackiw-Pi. Obtivemos o lagrangiano correspondente a partir da transformada inversa de Legendre com o objetivo de, posteriormente, obter as simetrias de Noether do modelo de Jackiw-Pi, dada a maior afinidade deste teorema com a função do lagrangiano. Daqui por diante, apresentaremos fundamentos matemáticos que irão estabelecer as ferramentas necessárias, como o próprio teorema de Noether, para além do que já foi apresentado, na busca de simetrias e, portanto, leis de conservação associadas. Estas buscas serão realizadas sobre as Eqs. (2.2a) e (2.2b).

3 SIMETRIAS E LEIS DE CONSERVAÇÃO

A descoberta de que há uma relação intrínseca entre propriedades de simetria e leis de conservação de um sistema mecânico conta desde o século XX, tendo adquirido uma grande importância na física, não sendo exclusiva da mecânica clássica. Constitui-se numa relação fundamental da física a vinculação entre simetrias e leis de conservação [1]. A relação entre propriedades de simetria de um sistema mecânico e a lei de conservação, corresponde à invariância do sistema sob certas transformações. Esta conexão é determinada pelo teorema de Noether, que prova que as simetrias da integral de ação conduzem às leis de conservação correspondentes através da equação de Euler-Lagrange [46, 47]. Maiores detalhes encontram-se nas referências [48, 49].

As transformações, definidas num grupo, levam uma determinada expressão a ser invariante em sua forma. Isto é resultado do sistema ser invariante sob uma dada transformação ou apresentar simetria sob o parâmetro de transformação para o qual o sistema é invariante mediante a transformação aplicada [2]. Isto forma o que é chamado de grupo de simetrias. Num grupo contínuo, todos os elementos do grupo estão contidos no conjunto \mathbb{R} . Isto implica que, para cada grupo uniparamétrico de difeomorfismos de um sistema lagrangiano, há uma quantidade conservada, também chamada de constantes de movimento [50], definidas aqui no grupo de Galileu, no limite não-relativístico.

Pelo formalismo lagrangiano, teremos um sistema descrito pelo lagrangiano L , tal que

$$L = L(q, \dot{q}, t), \quad (3.1)$$

conforme apresentado pela Eq. (2.13), onde q , \dot{q} representam as coordenadas generalizadas de posição e velocidade, respectivamente, e t o tempo, sendo $\dot{q} = dq/dt$. Se não há dependência explícita de uma determinada coordenada, o lagrangiano é invariante, ou simétrica, sob uma certa transformação realizada sobre esta coordenada [51].

Para o funcional da ação, seja $S = S[L]$ o funcional de $L = L(q, \dot{q}, t)$, temos

$$S[L] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}; t) dt, \quad (3.2)$$

caracterizando um extremo de S .

Neste capítulo apresentaremos objetivamente alguns fundamentos matemáticos que declaram os elementos de aplicação do teorema de Noether em nosso trabalho. Determinaremos, na seção 3.1, os grupos de transformações infinitesimais fundamentados nas simetrias de Lie,

grupo ao qual pertence o grupo de simetrias de Noether. Na seção 3.2, definimos o teorema de Noether e o invariante correspondente e apresentaremos as condições de simetrias de Noether, o que define as condições que um dado lagrangiano deve possuir para a aplicabilidade do teorema. Finalizaremos este capítulo com a seção 3.3 definindo brevemente o conceito de sistemas integráveis e os colchetes de Poisson.

3.1 SIMETRIAS DE LIE

Os grupos de transformações infinitesimais e as simetrias de Lie estabelecem as condições para construção de soluções invariantes, tendo em vista os fundamentos das leis de conservação. A invariância de equações diferenciais, submetidas a determinadas transformações, representa o fundamento da teoria de simetrias de Lie. Essas transformações, que ocorrem sobre as variáveis dependentes e independentes das equações, formam um grupo local de transformações pontuais, designadas como simetrias pontuais, que dependem somente dos parâmetros contínuos dessas equações [46].

Esses grupos de transformação são completamente caracterizados por seus geradores infinitesimais [52, 53]. Se um sistema de equações diferenciais for invariante sob a ação de um grupo de transformações pontuais de Lie, é possível encontrar soluções especiais, as quais designamos como soluções invariantes.

Especificamente, trataremos de sistemas de EDOs de variável independente t e com variável dependente $q = q(t)$. Dadas as coordenadas, seja uma transformação infinitesimal geométrica e uniparamétrica, temos

$$\bar{q} = q + \varepsilon\eta(q,t), \quad (3.3)$$

$$\bar{t} = t + \varepsilon\tau(q,t), \quad (3.4)$$

para $\varepsilon \ll 1$ como parâmetro infinitesimal, η , τ funções inicialmente arbitrárias do espaço e do tempo. A informação contida na transformação infinitesimal é compactamente representada pelo operador diferencial

$$G = \tau(q,t)\frac{\partial}{\partial t} + \eta(q,t)\frac{\partial}{\partial q}, \quad (3.5)$$

chamado de gerador de simetria. Reescrevendo as Eqs. (3.3-3.4) em termos do operador G , temos

$$\bar{q} = q + \varepsilon Gq, \quad (3.6)$$

$$\bar{t} = t + \varepsilon Gt. \quad (3.7)$$

Para um sistema dinâmico, em que sejam válidas relações uniparamétricas de difeomorfismo de um certo lagrangiano, formalizado num sistema de equações diferenciais, temos

$$\frac{d\bar{q}}{d\varepsilon} = \eta(\bar{q}, \bar{t}), \quad \frac{d\bar{t}}{d\varepsilon} = \tau(\bar{q}, \bar{t}), \quad (3.8)$$

de condições iniciais

$$\bar{q}(\varepsilon = 0) = q, \quad \bar{t}(\varepsilon = 0) = t, \quad (3.9)$$

onde ε se apresenta como parâmetro temporal. A solução da Eq. (3.8), para as condições iniciais da Eq. (3.9), conduz a uma solução global da mesma equação.

Em transformações uniparamétricas da Eq. (3.3-3.4), quem varia é o parâmetro ε . Para atender o critério de que $L = L(q, \dot{q}, t)$, estendemos $G \rightarrow \mathcal{G}$, a fim de também realizar a operação sobre \dot{q} . Analisando a velocidade generalizada induzida pelas transformações, que definimos por $\bar{q}' = d\bar{q}/d\bar{t}$, através da expansão em série de potência, impondo invariância para todas as ordens de ε , temos

$$\frac{d\bar{q}}{d\bar{t}} = \frac{\dot{q} + \varepsilon \dot{\eta}}{1 + \varepsilon \dot{\tau}} \approx \dot{q} + \varepsilon(\dot{\eta} - \dot{\tau}\dot{q}). \quad (3.10)$$

De acordo com [54], a Eq. (3.10) fornece a transformação induzida na tangente da curva original respectiva à \dot{q} , apresentando a mudança induzida na velocidade a partir das transformações infinitesimais, onde se obtém

$$\bar{q}' = \dot{q} + \varepsilon(\dot{\eta} - \dot{\tau}\dot{q}), \quad (3.11)$$

onde $\dot{\eta}$ e $\dot{\tau}$ são dados por

$$\dot{\eta} = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial \eta}{\partial q} \quad (3.12)$$

e

$$\dot{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial q}. \quad (3.13)$$

A extensão do operador G , de acordo com as Eqs. (3.5), tal que $G \rightarrow \mathcal{G}$, é então escrita explicitamente por

$$\mathcal{G} = \tau \frac{\partial}{\partial t} + \eta \frac{\partial}{\partial q} + (\dot{\eta} - \dot{\tau} \dot{q}) \frac{\partial}{\partial \dot{q}}. \quad (3.14)$$

Com isso, \mathcal{G} opera sobre $L(q, \dot{q}, t)$, atendendo aos critérios necessários, onde a condição de invariância da integral de ação de $L(q, \dot{q}, t)$, sob o grupo de Lie para a Eq. (3.3-3.4), é condição necessária e suficiente para invariância do sistema.

Esta seção apresentou brevemente as transformações infinitesimais e operadores de simetria, advindos das simetrias de Lie (contidos na álgebra de Lie), aplicados sobre um lagrangiano arbitrário, a despeito de restrições. Para uma dada equação diferencial ordinária e suas condições iniciais, aplicamos certas transformações infinitesimais que devem permitir determinar grupos de simetria, podendo obter um conjunto de curvas integrais de solução de uma dada equação diferencial ordinária, a qual corresponde ao grupo invariante, de acordo com a transformação aplicada.

3.2 TEOREMA E INVARIANTE DE NOETHER

O teorema de Noether resulta da teoria de sistemas dinâmicos. Sua descrição formal vem da conexão entre propriedades de invariância, ou simetria, e quantidades conservadas para um dado lagrangiano, ou mesmo hamiltoniano, de acordo com certas transformações [15]. Toda grandeza física conservativa corresponde a um grupo contínuo de simetrias das equações, o que garante que uma transformação matemática, aplicada às equações, preserve as características essenciais dessas equações [48, 49, 51].

Conforme [51], a simetria sob uma transformação de coordenadas condiz com efeitos de uma transformação infinitesimal, tal como descrevemos na seção 3.1, onde tratamos das simetrias de Lie e realizamos as transformações através das Eqs. (3.3-3.4). Estas transformações operadas sobre $L(q, \dot{q}, t)$ devem nos conduzir para

$$\begin{aligned} \bar{L}(\bar{q}, \bar{q}', \bar{t}) &= L(q + \varepsilon \eta, \dot{q} + \varepsilon(\dot{\eta} - \dot{\tau} \dot{q}), t + \varepsilon \tau) \\ &= L(q, \dot{q}, t) + \varepsilon \left[\eta \frac{\partial L}{\partial q} + (\dot{\eta} - \dot{\tau} \dot{q}) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \tau \frac{\partial L}{\partial t} \right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

As transformações infinitesimais operadas sobre o funcional da ação, dado pela Eq. (3.2), conduzem ao teorema de Noether. Fazendo a integração desta relação em

$$d\bar{t} = d(t + \varepsilon\tau) = dt + \varepsilon\dot{\tau}dt, \quad (3.16)$$

temos,

$$\int \bar{L}(\bar{q}, \bar{q}', \bar{t}) d\bar{t} = \int \left[L(q, \dot{q}, t) + \varepsilon \left(\eta \frac{\partial L}{\partial q} + (\dot{\eta} - \dot{\tau}\dot{q}) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \tau \frac{\partial L}{\partial t} \right) \right] (dt + \varepsilon\dot{\tau}dt). \quad (3.17)$$

Desta expressão, eliminando o termo de 2° ordem para ε e, omitindo as dependências de $L(q, \dot{q}, t)$ e $\bar{L}(\bar{q}, \bar{q}', \bar{t})$, simplificando a notação, ficamos com

$$\int \bar{L}d\bar{t} = \int Ldt + \varepsilon \int \left[\tau \frac{\partial L}{\partial t} + \eta \frac{\partial L}{\partial q} + (\dot{\eta} - \dot{\tau}\dot{q}) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \dot{\tau}L \right] dt. \quad (3.18)$$

A fim de se obter a função que corresponde ao termo do funcional da ação associado ao parâmetro ε da Eq. (3.18), devemos encontrar uma derivada total em relação ao tempo. Com isso, designamos a função primitiva por $F = F(q, t)$ sem dependência em \dot{q} , dado que buscamos simetrias puntuais do sistema. Desta forma, a derivada total no tempo descrita por $\dot{F}(q, t)$ é

$$\dot{F} = \tau \frac{\partial L}{\partial t} + \eta \frac{\partial L}{\partial q} + (\dot{\eta} - \dot{\tau}\dot{q}) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \dot{\tau}L, \quad (3.19)$$

sendo que, por definição

$$\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial F}{\partial q}. \quad (3.20)$$

A constante de movimento de um sistema é o invariante do sistema. Designando I como o invariante de Noether, temos que $dI/dt = 0$. Reescrevendo a Eq. (3.19), temos

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \left(\dot{\tau}L + \tau \frac{dL}{dt} - \dot{\tau}\dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \tau\dot{q} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \dot{\eta} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \eta \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \\ &= \frac{d}{dt}(\tau L) - \frac{d}{dt} \left(\tau\dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{d}{dt} \left(\eta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left[\tau \left(L - \dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \eta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Com essa expressão, podemos escrever a definição do invariante de Noether, tal que

$$I = \tau \left(\dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - L \right) - \eta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + F, \quad (3.22)$$

correspondente a constante de movimento.

Desta forma, \dot{F} é uma função a ser determinada e resume a condição de invariância da ação através de

$$\mathcal{G}L = \dot{F}. \quad (3.23)$$

3.3 SISTEMAS INTEGRÁVEIS: COLCHETES DE POISSON

De acordo com [53], um sistema completamente integrável é aquele que corresponda a um sistema hamiltoniano que admite possibilidades finitas para a integral primeira. A maioria dos exemplos disponíveis correspondem a uma variedade de Poisson, que corresponde a uma variedade diferenciável, satisfazendo a identidade de Jacobi, dada na Eq. (3.32d), onde $\{, \}$ é o colchete de Poisson.

A título de contextualização, observamos que o campo vetorial de uma dada função H define o campo vetorial hamiltoniano X_H associado. H e X_H geram partições em subvariedades diferenciáveis de outra variedade diferenciável com dimensão idêntica, o que é chamado de folheação singular completamente integrável, definindo uma simetria de contato na álgebra de Lie. Por notação, define-se uma derivação $\{H, \cdot\}$ de um campo vetorial hamiltoniano X_H sobre uma variável dinâmica f , como

$$X_H \cdot f = \{H, f\} = df\{X_H\}. \quad (3.24)$$

A noção de integrabilidade de um sistema mecânico pode ser dita como a possibilidade de resolução explícita de suas equações de movimento, que ocorre por uma escolha apropriada de coordenadas generalizadas, além de depender também do sistema físico. Conjuntamente, isso determina a separabilidade das equações de Hamilton-Jacobi. Assim, estas equações tornam-se separáveis em certo sistema de coordenadas, com resolução das equações de movimento por quadraturas [1, 53, 50].

De modo geral, de acordo com [1], seja $f = f(q, p, t)$ uma função dinâmica arbitrária das variáveis canônicas (\mathbf{q}, \mathbf{p}) e do tempo t , temos

$$\frac{df}{dt} = \sum_k^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (3.25)$$

onde,

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}. \quad (3.26)$$

Para a Eq. (3.25) teremos, naturalmente,

$$\frac{df}{dt} = \sum_k^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (3.27)$$

De acordo com [55], se \mathbb{V} é um espaço vetorial e h é uma variável dinâmica, de modo que $f, h : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ tem classe C^∞ , as variáveis dinâmicas na forma de $\{f, h\} : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ corresponderão à função

$$\{f, h\} = \sum_i^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial h}{\partial q_i} \right), \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.28)$$

a qual é designada como colchete de Poisson. Com isso, se h corresponde ao hamiltoniano H , então reescrevemos a Eq. (3.25) como

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (3.29)$$

Desta forma, assumindo as quantidades q_k e p_k , teremos as equações de Hamilton em termos dos colchetes de Poisson, de modo que

$$\dot{q}_k = \{q_k, H\}, \quad (3.30a)$$

$$\dot{p}_k = \{p_k, H\}. \quad (3.30b)$$

A integrabilidade de uma sistema com n graus de liberdade está intimamente associada à existência de n constantes de movimento [1]. Conforme o teorema de Poisson, o colchete de Poisson

de duas constantes de movimento também correspondem a uma constante de movimento. Assim, sejam f e g constantes de movimento de um dado sistema descrito por H , então as formas

$$\{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0, \quad (3.31a)$$

$$\{g, H\} + \frac{\partial g}{\partial t} = 0, \quad (3.31b)$$

expressam as relações de H com as constantes de movimento f e g , que assumem a forma de uma equação de continuidade.

Os colchetes de Poisson obedecem as seguintes propriedades:

a) Anti-simetria: $\{f, g\} = -\{g, f\};$ (3.32a)

b) Linearidade: $\{f + \lambda g, h\} = \{f, h\} + \lambda \{g, h\};$ (3.32b)

d) Regra de Leibniz: $\frac{\partial}{\partial t} \{f, g\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\};$ (3.32c)

e) Identidade de Jacobi: $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0.$ (3.32d)

As Eqs. (3.32c) e (3.32d) são válidas para o caso em que $f, g \in C^\infty$. A Eq. (3.32d) representa a identidade de Jacobi, que na forma da regra de Leibniz, é escrita como

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}. \quad (3.33)$$

Encerramos este capítulo tendo apresentado os elementos matemáticos necessários para aplicação do teorema de Noether sobre o sistema de EDOs do modelo de Jackiw-Pi. Destacamos as Eqs. (3.19) e (3.22) como resultado de transformações infinitesimais aplicadas sobre um dado lagrangiano arbitrária e o funcional da ação correspondente, sem observar aspectos restritivos. Podemos dizer que estas equações constituem o fundamento da construção das soluções invariantes que passaremos a buscar no Cap. 4, no modelos que estamos estudando, definindo constantes de movimento deste sistema e obtendo a integrabilidade das equações.

4 APLICAÇÃO DO TEOREMA DE NOETHER À BICAMADA DE GRAFENO

Neste capítulo, realizaremos a aplicação do teorema de Noether sobre o modelo proposto por Jackiw-Pi para bicamada de grafeno [7]. O modelo constitui-se no par de EDOs lineares de primeira ordem acopladas, dadas pelas Eqs. (2.2a-2.2b), reformulada conforme [13].

Especificamente, o método de simetrias de Noether permitirá, *a priori*, calcular simetrias pontuais do modelo de Jackiw-Pi, associado-se desta forma às leis de conservação do próprio sistema mecânico. Encontrando as constantes de movimento do modelo, podemos comparar os casos exatamente solúveis em termos do campo de calibre. São apresentadas então as soluções analíticas obtidas por [9], onde se obtém a integrabilidade das equações.

Como sabemos, o teorema de Noether é aplicado sobre o lagrangiano em razão da sua estreita relação com a respectiva função do lagrangiano, para os casos em que estão envolvidas as leis de conservação e, presumidamente, a presença de um invariante determinado por uma constante de movimento pertencente a algum grupo de simetria. Resultados preliminares já nos conduziram às classes de funções a serem encontradas.

4.1 SIMETRIAS DE NOETHER DO MODELO DE JACKIW-PI

O modelo de Jackiw-Pi se reduz às duas EDOs lineares de primeira ordem acopladas, dadas pelas Eqs. (1.50a-1.50b). Estas equações foram reformuladas em equações equivalentes via Eqs. (2.2a-2.2b). O parâmetro que define essas equações é descrito pelo campo escalar $\phi(r)$ dado pela Eq. (1.53), que descreve a dimerização submetida ao campo de calibre $A(r)$ nas condições de contorno $A(0) = 0$ e $A(\infty) = 1/2$.

As simetrias de Noether pertencem a um subgrupo das simetrias de Lie. As transformações infinitesimais devem ser aplicadas sobre o lagrangiano da Eq. (2.13). Isto deve determinar uma lei de conservação associada à dinâmica do sistema, o que sugere a presença de constantes de movimento.

Conforme verificado no Cap. 3, o operador de simetria dado pela Eq. (3.14) sobre a integral de ação do lagrangiano $L = L(q, \dot{q}, t)$, gera a condição de invariância, dada pela Eq. (3.19), reescrito na Eq. (3.21).

O procedimento para calcular simetrias puntuais de Noether é bem conhecido [15]. Inserido o lagrangiano, dada na Eq. (2.13), na condição de simetria dada pela Eq. (3.19), obtemos o seguinte desdobramento para cada termo à esquerda da igualdade da Eq. (3.19):

1° termo,

$$\begin{aligned}\tau \frac{\partial L}{\partial t} &= \cancel{\tau \dot{q} \ddot{q}} - \tau \phi \dot{\phi} \dot{q} - \cancel{\tau \phi q \ddot{q}} + \tau \phi \dot{\phi} q^2 \\ &= -\tau \phi \dot{\phi} \dot{q} + \tau \phi \dot{\phi} q^2\end{aligned}\quad (4.1a)$$

2° termo,

$$\eta \frac{\partial L}{\partial q} = \eta(1 - \phi^2)q + \eta \phi q;\quad (4.1b)$$

3° termo,

$$\begin{aligned}(\dot{\eta} - \dot{\tau} \dot{q}) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} &= (\dot{\eta} - \dot{\tau} \dot{q})(\dot{q} - \phi q) \\ &= \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial \eta}{\partial q} \right) (\dot{q} - \phi q) - \left(\frac{\partial \tau}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial q} \right) \dot{q} (\dot{q} - \phi q) \\ &= \dot{q} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \dot{q}^2 \frac{\partial \eta}{\partial q} - \phi q \dot{q} \frac{\partial \eta}{\partial t} - \phi q \dot{q} \frac{\partial \eta}{\partial q} - \dot{q}^2 \frac{\partial \tau}{\partial t} - \dot{q}^3 \frac{\partial \tau}{\partial q} + \cancel{\phi q \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial t}} + \cancel{\phi q \dot{q}^2 \frac{\partial \tau}{\partial q}};\end{aligned}\quad (4.1c)$$

4° termo,

$$\begin{aligned}\dot{\tau} L &= \left(\frac{\partial \tau}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial q} \right) L \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial \tau}{\partial t} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau}{\partial t} (1 - \phi^2) q^2 - \cancel{\phi q \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial t}} + \frac{1}{2} \dot{q}^3 \frac{\partial \tau}{\partial q} - \frac{1}{2} (1 - \phi^2) q^2 \dot{q} \frac{\partial \tau}{\partial q} - \cancel{\phi q \dot{q}^2 \frac{\partial \tau}{\partial q}}.\end{aligned}\quad (4.1d)$$

Como estamos determinando simetrias puntuais do sistema, cancelamos a quantidade \ddot{q} na Eq. (4.1a), dado que a quantidade é nula. Os casos em que \ddot{q} é não-nula, correspondem às simetrias dinâmicas de um sistema, caso além de nosso escopo.

Após cancelarmos os termos semelhantes e fazermos um ordenamento para expressão da Eq.

(4.1) de acordo com cada um dos graus da quantidade \dot{q} , temos

$$\dot{F} = \dot{q}^3 \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial \tau}{\partial q} \right\} \quad (4.2a)$$

$$+ \dot{q}^2 \left\{ \frac{\partial \eta}{\partial q} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau}{\partial t} \right\} \quad (4.2b)$$

$$+ \dot{q} \left\{ -\phi \dot{q} \tau - \phi \eta + \frac{\partial \eta}{\partial t} - \phi q \frac{\partial \eta}{\partial q} - \frac{1}{2} (1 - \phi^2) q^2 \frac{\partial \tau}{\partial q} \right\} \quad (4.2c)$$

$$+ \dot{q}^{(0)} \left\{ \phi \dot{\phi} q^2 \tau - \eta (1 - \phi^2) q - \phi q \frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{1}{2} (1 - \phi^2) q^2 \frac{\partial \tau}{\partial t} \right\}, \quad (4.2d)$$

onde associamos os diferentes graus de \dot{q} de acordo com a derivada total $\dot{F} = F_t + \dot{q}F_q$, a Eq. (3.20). Isto nos leva a

$$\dot{q}^3 \rightarrow \frac{\partial \tau}{\partial q} = 0, \quad (4.3a)$$

$$\dot{q}^2 \rightarrow \frac{\partial \eta}{\partial q} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau}{\partial t} = 0. \quad (4.3b)$$

$$\dot{q} \rightarrow -\tau \dot{\phi} q - \eta \phi + \frac{\partial \eta}{\partial t} - \phi q \frac{\partial \eta}{\partial q} = F_q, \quad (4.3c)$$

$$\dot{q}^{(0)} \rightarrow \tau \phi \dot{\phi} q^2 - \eta (1 - \phi^2) q - \phi q \frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{1}{2} (1 - \phi^2) q^2 \frac{\partial \tau}{\partial t} = F_t. \quad (4.3d)$$

Naturalmente, $\frac{\partial \tau}{\partial q}$ não é exibido na Eq. (4.3c) por se mostrar-se nulo na Eq. (4.3a).

A partir dos termos das Eqs. (4.3a)-(4.3b), temos

$$\tau = T(t), \quad (4.4a)$$

$$\eta = \frac{1}{2} \dot{T} q - g(t), \quad (4.4b)$$

onde $T = T(t)$ e $g = g(t)$ são funções unicamente dependentes do tempo.

É possível obtermos o cancelamento do polinômio linear em q a partir das Eqs. (4.3c) e (4.3d) associadas à $F_{qt} = F_{tq}$, conforme

$$\frac{\partial}{\partial q} F_t = \frac{\partial}{\partial t} F_q. \quad (4.5)$$

A partir da Eq. (4.3c), temos

$$\begin{aligned} F_q &= -T\dot{\phi}q - \phi\left(\frac{1}{2}\dot{T}q - g\right) + \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\dot{T}q - g\right) - \phi q \frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{2}\dot{T}q - g\right) \\ &= \left(\frac{1}{2}\ddot{T} - \phi\dot{T} - \dot{\phi}T\right)q + \left(\phi g - \dot{g}\right)q^{(0)}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde derivando parcialmente em t , temos

$$\begin{aligned} F_{tq} &= \frac{\partial}{\partial t} F_q \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{1}{2}\ddot{T} - \phi\dot{T} - \dot{\phi}T \right) q + \phi g - \dot{g} \right] \\ &= \left\{ \frac{1}{2}\ddot{T} - \phi\ddot{T} - 2\dot{\phi}\dot{T} - \ddot{\phi}T \right\} q + \left\{ \dot{\phi}g + \phi\dot{g} - \ddot{g} \right\} q^{(0)}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Da Eq. (4.3d), temos

$$\begin{aligned} F_t &= T\phi\dot{\phi}q^2 - \left(\frac{1}{2}\dot{T}q - g\right)(1 - \phi^2)q - \phi q \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\dot{T}q - g\right) - \frac{1}{2}(1 - \phi^2)q^2 \frac{\partial}{\partial t}T \\ &= \left(-\frac{1}{2}\phi\ddot{T} - (1 - \phi^2)\dot{T} + \phi\dot{\phi}T \right) q^2 + \left((1 - \phi^2)g + \phi\dot{g} \right) q \end{aligned} \quad (4.8)$$

que derivando parcialmente em q , nos dá

$$\begin{aligned} F_{qt} &= \frac{\partial}{\partial q} F_t \\ &= \left\{ -\phi\ddot{T} - 2(1 - \phi^2)\dot{T} + 2\phi\dot{\phi}T \right\} q + \left\{ (1 - \phi^2)g + \phi\dot{g} \right\} q^{(0)}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Os cancelamentos em q e $q^{(0)}$ nas Eqs. (4.7) e (4.9) resultam em

$$q \rightarrow \ddot{T} + 4\omega^2\dot{T} + 4\omega\dot{\omega}T = 0, \quad (4.10a)$$

$$q^{(0)} \rightarrow \ddot{g} + \omega^2g = 0, \quad (4.10b)$$

onde $\omega = \omega(t)$, que tem a relação $\omega^2 = 1 - \phi - \phi^2$, é a frequência de oscilação, conforme Eq. (2.17).

Identicamente, a variável auxiliar g satisfaz a mesma equação da variável dinâmica q , conforme as Eqs. (2.18) e (4.10b). De acordo com [56], a equação linear de terceira ordem (4.10a) possui aplicações recentes para dispersão de mudanças de fase em um contexto diferente. Como apresentado na Sec.2.4, fazendo $T = \rho^2$, obtemos a Eq. (2.21), aqui reexibida,

$$\rho \ddot{\rho} + 3\dot{\rho}\dot{\rho} + 4\omega^2\rho\dot{\rho} + 2\omega\dot{\omega}\rho^2 = 0,$$

expressão que pode ser integrada, resultando na equação de Pinney, dada pela Eq. (2.19), também reexibida

$$\ddot{\rho} + \omega^2(t)\rho = \frac{\kappa}{\rho^3}.$$

A partir das Eqs. (4.6) (ou da Eq. (4.8)), podemos encontrar

$$\begin{aligned} F &= \int \left[\left(\frac{1}{2}\ddot{T} - \phi\dot{T} - T\dot{\phi} \right) q + \phi g - \dot{g} \right] dq \\ &= \left(\frac{\dot{T}}{2} - \phi\dot{T} - \dot{\phi}T \right) \frac{q^2}{2} + (\phi g - \dot{g})q + F_0, \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde F_0 é uma constante numérica que será definida como zero, sem perda de generalidade. De maneira correspondente, usando a definição para o invariante de Noether, dado pela Eq. (3.22), temos que

$$I = \frac{T}{2}\dot{q}^2 - \frac{\dot{T}}{2}q\dot{q} + (\ddot{T} + 2\omega^2T)\frac{q^2}{4} + g\dot{q} - \dot{g}q. \quad (4.12)$$

As transformações infinitesimais puntuais retornam o gerador de simetria de Lie, dado pela Eq. (3.5). Com isso, de acordo com [15], o gerado de simetria puntual de Noether é dado por

$$G = T \frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\dot{T}}{2}q - g \right) \frac{\partial}{\partial q}. \quad (4.13)$$

Através do total de cinco soluções lineares independentes, as equações lineares (4.10a) e (4.10b) têm, ao menos, uma com grupo de cinco parâmetros de simetria pontuais de Noether, as quais podem ser imediatamente encontradas. Para cada gerador, há uma quantidade conservada via Eq. (4.12). Dentre esses cinco invariantes, somente dois são funcionalmente independentes. Note que as assintotas do campo de calibre $A(r)$, na Eq. (1.53), limitam-se às simetrias e invariantes de Noether admissíveis.

Em termos da solução ρ para a equação de Pinney, tal que $T = \rho^2$, devemos ter

$$I = I_{EL} + W, \quad (4.14)$$

onde

$$I_{EL} = \frac{1}{2}(\rho\dot{q} - \dot{\rho}q)^2 + \frac{\kappa}{2}\left(\frac{q}{\rho}\right)^2, \quad (4.15a)$$

$$W = g\dot{q} - \dot{g}q, \quad (4.15b)$$

são dois invariantes funcionalmente independentes. A quantidade conservada da Eq. (4.14) consiste em duas partes; a parte Ermakov-Lewis I_{EL} e a contribuição residual não-nula W de cada solução não-trivial de g . Esta última parte surge que, tanto para q quanto para g , devemos ter a mesma equação OHDT, conforme Eqs. (2.18) e (4.10b). O Wronskiano W das duas soluções particulares, Eq.(4.15b), é independente da equação linear de segunda ordem por ser uma constante de movimento. Conforme observado por [57], por exemplo, a constância do Wronskiano neste caso não é um fato acidental, mas o resultado advindo de uma invariância de simetria.

No presente caso, temos então

$$G = \rho^2 \frac{\partial}{\partial t} + (\rho\dot{\rho}q - g) \frac{\partial}{\partial q}. \quad (4.16)$$

De qualquer forma, as últimas expressões tradicionais dadas pelas Eqs. (4.12) e (4.13), apresentam claramente que uma maneira de encontrar invariantes e simetrias de Noether é reduzida, neste caso, a um par de equações lineares; a equação de terceira ordem (4.10a) para T e a de segunda ordem (4.10b) para g .

4.2 SIMETRIA ALGÉBRICA E O INVARIANTE DE NOETHER

Suponha uma solução particular não-trivial exata conhecida para $g_1 = g_1(t)$ do OHDT para a Eq. (4.10b) na qual, formalmente, tem-se a mesma equação que satisfaz a variável dinâmica $q(t)$. Sabidamente, uma segunda solução linearmente independente para o OHDT será dada por

$$g_2 = g_2(t) = g_1(t) \int dt/g_1^2(t). \quad (4.17)$$

Este par de soluções da Eq. (4.15b) tem Wronskiano unitário $g_1\dot{g}_2 - g_2\dot{g}_1 = 1$. A solução geral da Eq. (4.10b) é

$$g = c_1g_1 + c_2g_2, \quad (4.18)$$

onde $c_{1,2}$ são constantes numéricas arbitrárias. Certamente que um par diferente de soluções fundamentais pode ser escolhido. Entretanto, utilizar um Wronskiano unitário simplifica diversos fatores numéricos que poderiam surgir. Assim, dado g_1 , pela Eq. (4.17), assume-se g_2 daqui por diante.

A solução geral da equação de Pinney é dada pela lei de superposição não-linear, tal que

$$\rho = (c_3g_1^2 + 2c_4g_1g_2 + c_5g_2^2)^{1/2},$$

onde $c_{3,4,5}$ são constantes numéricas que satisfazem $c_3c_5 - c_4^2 = \kappa$. A partir de $T = \rho^2$, obtém-se a solução geral da equação linear, dada pela Eq. (4.10a) na forma de

$$T = c_3T_1 + c_4T_2 + c_5T_3, \quad (4.19)$$

onde

$$T_1 = g_1^2, \quad T_2 = 2g_1g_2, \quad T_3 = g_2^2, \quad (4.20)$$

são soluções particulares linearmente independentes. Substituindo $T_{1,2,3}$ na Eq. (4.10a), de fato se resolve a expressão, desde que g_1 resolva a Eq. (4.10b) para o OHDT e g_2 seja dado pela Eq. (4.17).

Ao invés de iniciarmos pela equação não-linear de Pinney para obtermos κ , daremos atenção à equação linear de terceira ordem dada pela Eq. (4.10a), em que demonstramos ser exatamente solúvel no lugar de ser apenas uma solução particular disponível para a equação do OHDT. O parâmetro κ é determinado posteriormente a partir de uma escolha arbitrária para $c_{3,4,5}$. Desta forma, o gerador de simetria da Eq. (4.13) é dado por

$$G = c_1 G_1 + c_2 G_2 + c_3 G_3 + c_4 G_4 + c_5 G_5, \quad (4.21)$$

onde

$$G_1 = -g_1 \frac{\partial}{\partial q}, \quad (4.22a)$$

$$G_2 = -g_2 \frac{\partial}{\partial q}, \quad (4.22b)$$

$$G_3 = g_1^2 \frac{\partial}{\partial t} + g_1 \dot{g}_1 \frac{\partial}{\partial q} \quad (4.22c)$$

$$G_4 = 2g_1 g_2 \frac{\partial}{\partial t} + (g_1 \dot{g}_2 - g_2 \dot{g}_1) q \frac{\partial}{\partial q}, \quad (4.22d)$$

$$G_5 = g_2^2 \frac{\partial}{\partial t} + g_1 \dot{g}_2 q \frac{\partial}{\partial q}. \quad (4.22e)$$

O invariante de Noether, da Eq. (4.12) correspondente, é dado por

$$I = c_1 I_1 + c_2 I_2 + c_3 I_3 + c_4 I_4 + c_5 I_5, \quad (4.23)$$

onde cada I_i está associado a G_i , para $i = 1, \dots, 5$, e

$$I_1 = g_1 \dot{q} - \dot{g}_1 q, \quad (4.24a)$$

$$I_2 = g_2 \dot{q} - \dot{g}_2 q, \quad (4.24b)$$

$$I_3 = \frac{1}{2} (g_1 \dot{q} - \dot{g}_1 q)^2 = \frac{I_1^2}{2}, \quad (4.24c)$$

$$I_4 = g_1 g_2 \dot{q}^2 - (g_1 \dot{g}_2 + g_2 \dot{g}_1) q \dot{q} + \dot{g}_1 \dot{g}_2 q^2 = I_1 I_2, \quad (4.24d)$$

$$I_5 = \frac{1}{2} (g_2 \dot{q} - \dot{g}_2 q)^2 = \frac{I_2^2}{2}. \quad (4.24e)$$

O invariante de Ermakov-Lewis da Eq. (4.15a), juntamente com ρ , apresentado na Eq. (2.25), pode ser expresso como

$$I_{EL} = c_3 I_3 + c_4 I_4 + c_5 I_5, \quad (4.25)$$

o que, *a priori*, era esperado [15, 58, 59]. Isto também pode ser verificado calculando diretamente como uma constante de movimento. Desta forma, observa-se que o invariante de Ermakov-Lewis pode ser dividido em uma combinação linear de funções quadráticas do Wronskiano conservado. A parte restante do Wronskiano, correspondente ao invariante de Noether, é dado por

$$W = c_1 I_1 + c_2 I_2. \quad (4.26)$$

Pelo comutador $[G_i, G_j] = G_i G_j - G_j G_i$, pode-se encontrar a álgebra de simetria, tal que

$$[G_1, G_2] = [G_1, G_3] = [G_2, G_4] = [G_2, G_5] = 0, \quad (4.27a)$$

$$[G_1, G_4] = G_1, \quad (4.27b)$$

$$[G_1, G_5] = G_2, \quad (4.27c)$$

$$[G_2, G_3] = -G_1, \quad (4.27d)$$

$$[G_3, G_4] = 2G_3, \quad (4.27e)$$

$$[G_3, G_5] = G_4, \quad (4.27f)$$

$$[G_4, G_5] = 2G_5. \quad (4.27g)$$

A descrição mais simples das simetrias e invariantes de Noether é fornecida por $I_{1,2}$, com os correspondentes geradores de simetrias comutáveis $G_{1,2}$ expandidos num subgrupo Abelianamente bidimensional. Os invariantes $I_{1,2,3}$ restantes, são funções quadráticas dos blocos de construção $I_{1,2}$. O acoplamento não linear κ e o quadrado do Wronskiano foram obtidos no contexto dos sistemas de Reid, a partir da Eq. (20) em [60]. Se trata de uma forma alternativa, equivalente e mais simples, em termos dos quadrados de duas constantes de superposição.

O grupo 5-dimensional das simetrias pontuais de Noether é um subgrupo do grupo de Lie 8-dimensional máximo $\mathfrak{sl}(3, \mathbb{R})$, admitido pelo oscilador harmônico simples [61, 52] e pelo OHDT [58]. A conexão com o OHDT vem devido o lagrangiano da Eq. (2.13) ser, em si, definida por

$$L = \mathcal{L} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\phi(t)q^2}{2} \right), \quad (4.28)$$

onde

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - \frac{1}{2}\omega^2(t)q^2 \quad (4.29)$$

é o lagrangiano padrão para o OHDT, onde ω é dado pela Eq. (2.17). A adição de uma derivada total não irá modificar nenhuma das equações de movimento ou simetrias de Noether atinentes ao caso. Este aspecto é interessante para se obter álgebra de invariantes, que expressa-se em termos de (q, p, t) , onde $p = \dot{q} - \phi(t)q$ é o *momentum* canônico, conforme Eq. (2.11). Desta forma, considerando

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \quad (4.30)$$

a forma canônica do colchete de Poisson, onde $A = A(q, p, t)$ e $B = B(q, p, t)$, os resultados essenciais são dados por

$$\{I_1, I_2\} = 1, \quad (4.31a)$$

$$\{I_1, I_4\} = \{I_2, I_2\} = I_1, \quad (4.31b)$$

$$\{I_1, I_5\} = \{I_4, I_2\} = I_2, \quad (4.31c)$$

$$\{I_1, I_3\} = \{I_2, I_5\} = 0, \quad (4.31d)$$

$$\{I_3, I_4\} = I_1^2, \quad (4.31e)$$

$$\{I_3, I_5\} = I_1 I_2, \quad (4.31f)$$

$$\{I_4, I_5\} = I_2^2. \quad (4.31g)$$

Válido observar que diversos fatores numéricos das Eqs. (4.27) e (4.31) são simplificados graças a termos, para g_1, g_2 , um Wronskiano unitário.

Tanto a equação do OHDT quanto a equação de Pinney são sistemas de Lie (ver, por exemplo, [62, 63]) com a mesma álgebra de Lie de Gulberg-Vessiot, $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$. Os resultados desta seção podem ser derivados deste ponto de vista [64, 65], exceto para a derivação imediata dos

invariantes de Noether e sua álgebra associada, mostrada na Eq. (4.31). Da mesma forma, as simetrias de Lie do sistema Ermakov-Pinney, sem referência ao teorema de Noether e ao grafeno, incluem e generalizam as simetrias de Noether apontadas aqui [66, 59, 67]. Simetrias e leis de conservação para sistemas Ermakov n -dimensionais generalizados foram analisadas em [68], a partir do teorema de Noether.

4.3 ABORDAGEM DIRETA

A abordagem direta para a álgebra de simetria explícita parte de um campo de calibre conhecido $A(r)$ com as assíntotas esperadas. Para isto, seguimos sistematicamente os passos a seguir:

- A partir de $A(r)$, deriva-se $\Phi(r)$, $\phi(t)$ e $\omega(t)$ usando respectivamente as Eqs. (1.53), (2.1) e (2.17).
- Obtém-se a solução particular de $g_1(t)$ resolvendo a Eq. (4.10b), e com a isso, g_2 por quadratura (4.17).
- Os geradores de simetrias de Noether são encontrados a partir das Eqs. (4.27) e os invariantes a partir das Eqs. (4.24).

É indiferente iniciar por $A(r)$ ou $\phi(t)$. Sendo assim, pela Eq. (1.53), devemos ter

$$k \left(\frac{1}{2} - A(r) \right) = Vr\phi(Vr), \quad (4.32)$$

onde k é um inteiro aditivo. A partir das assíntotas $A(0) = 0$, $A(\infty) = 1/2$, devemos ter

$$t\phi(t) \sim \frac{k}{2} \quad \text{para } t \rightarrow 0, \quad (4.33a)$$

$$t\phi(t) \rightarrow 0 \quad \text{para } t \rightarrow \infty. \quad (4.33b)$$

4.4 EXEMPLO

A partir da Eq. (4.33b), temos genericamente $\omega^2 \sim 1/t^2$ para $t \rightarrow 0$, o que resulta para $t = 0$ num ponto singular para a Eq. (4.3b), tornando-se difícil obter uma solução analítica exata.

Ainda assim, uma solução numérica pode ser encontrada fazendo $g(t_0) = 1$, $\dot{g}(t_0) = 0$, dado g_1 . E com $g(t_0) = 0$, $\dot{g}(t_0) = 1$ dado g_2 , em que $g_{1,2}$ devem possuir um Wronskiano unitário, sendo que $t_0 > 0$ é uma referência temporal. A solução obtida para a amplitude apresenta uma leve sensibilidade, de acordo com a escolha de t_0 e k . Como $\omega^2 \rightarrow 1$ num tempo extenso t , a solução passa a ser senoidal, na medida em que a frequência angular ω passa a adquirir o valor unitário, o que também pode ser expresso em termos de funções de Bessel para $t \rightarrow 0$, conforme observado por [7].

Para fins de ilustração, tomamos

$$\phi = \frac{k}{2} K_1(t), \quad (4.34)$$

que satisfaz as condições de (4.33b), onde $K_1(t)$ é uma função de Bessel modificada de segunda espécie. Isto é similar ao perfil do potencial vetor para o decaimento do campo magnético com soluções para vórtices, na teoria de Ginzburg-Landau [69]. Exemplos de soluções numéricas são apresentados nas Figs. 4.1 e 4.3 para valores diferentes de k , t_0 . Os detalhes das amplitudes e fases podem ser observados como sendo muito sensíveis para k , t_0 .

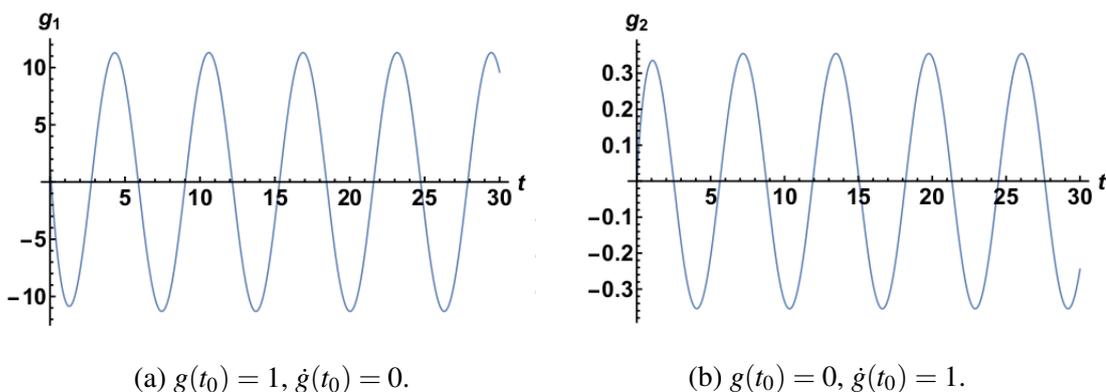


Figura 4.1 – Solução numérica para a Eq. (4.3b) com ϕ dado pela Eq. (4.34), com $k = 1$, $t_0 = 10^{-2}$.

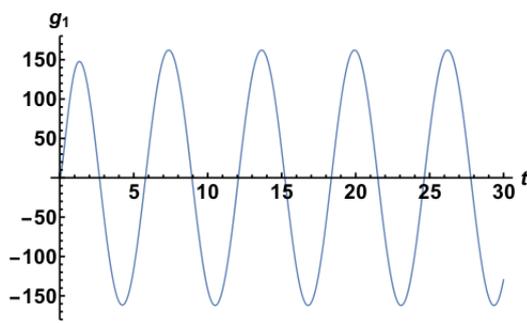
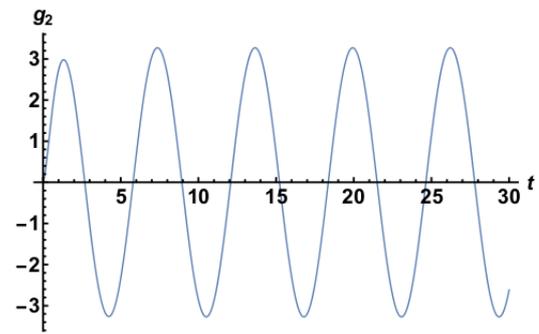
(a) $g(t_0) = 1, \dot{g}(t_0) = 0$.(b) $g(t_0) = 0, \dot{g}(t_0) = 1$.

Figura 4.2 – Solução numérica para a Eq. (4.3b) com ϕ dado pela Eq. (4.34), com $k = 3, t_0 = 10^{-2}$.

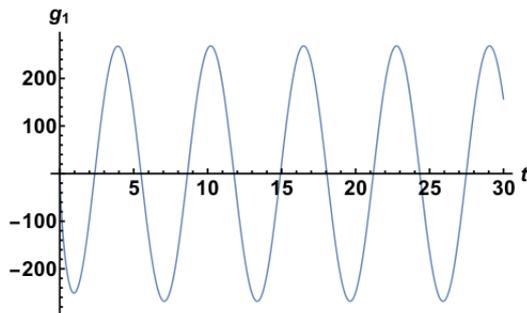
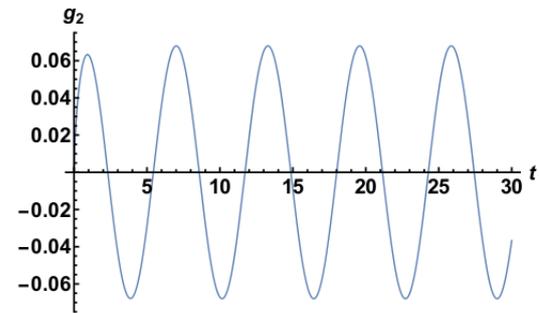
(a) $g(t_0) = 1, \dot{g}(t_0) = 0$.(b) $g(t_0) = 0, \dot{g}(t_0) = 1$.

Figura 4.3 – Solução numérica para a Eq. (4.3b) com ϕ dado pela Eq. (4.34), com $k = 1, t_0 = 10^{-4}$.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho foi possível analisar as simetrias pontuais de Noether para o modelo de Jackiw-Pi para a bicamada de grafeno, restrito a um campo de calibre. Fizemos breves revisões de conceitos fundamentais para o desenvolvimento do texto, estabelecendo conceitos básicos do grafeno em monocamada e bicamada. Uma breve reconstrução das pesquisas [3, 11, 12] que induziram o trabalho de Jackiw-Pi foi realizada, sendo possível apresentar seu postulado para o *Ansatz* na forma de um par de EDOs lineares de primeira ordem acopladas, dadas pelas Eqs. (1.50a) e (1.50b), em concordância com [13] para a abordagem do invariante de Ermakov-Lewis do modelo. A partir desta abordagem, estabelecemos a hipótese da existência de alguma lei de conservação associada ao sistema e construímos o hamiltoniano, que se apresentou não-trivial conforme Eq. (2.6), dado o campo de calibre aplicado às Eqs. (1.50a) e (1.50b), as quais resultaram no sistema de equações dadas pelas Eqs. (2.2a) e (2.2b), formulando as variáveis dinâmicas p e q deste sistema. Sabendo que estas leis de conservação estão associadas a determinadas condições de invariância e simetria de um dado sistema, a solução exata para o modelo de Jackiw-Pi, *a priori*, deve ser obtida num sistema completamente integrável.

Apresentamos aspectos objetivos das simetrias de Lie, estabelecendo o grupo de transformações infinitesimais e definindo geradores infinitesimais de simetria. Estas transformações, operadas sobre o funcional da ação, dado pela Eq. (3.2), conduziram ao teorema de Noether, o qual definiram as simetrias e o invariante de Noether, conforme Eq. (3.22), correspondente a um subgrupo pertencente ao grupo de simetrias de Lie.

Dada a maior afinidade do teorema de Noether com a função do lagrangiano, obtivemos o lagrangiano quadrático, dada pela Eq. (2.13) a partir da transformada de Legendre inversa sobre o hamiltoniano quadrático dado na Eq. (2.6), objeto de nossa hipótese. A aplicação do teorema de Noether, realizada no Cap. 4, permitiu construir o gerador de simetrias pontuais, dado pela Eq. (4.13). Por este gerador, ao que podemos também chamar de operador de simetria puntual de Noether, obtivemos as constantes de movimento do sistema, o que nos conduziu às equações desacopladas em termos das variáveis dinâmicas p e q . A álgebra de simetria é encontrada como sendo da mesma forma do OHDT, ao observarmos a existência de um lagrangiano equivalente para o OHDT, o que naturalmente demonstra o teorema como uma ferramenta poderosa para verificar a existência das condições de invariância e simetria. Embora o aspecto de *Ansatz* das equações não definirem a mensuração de uma grandeza específica, é modulado o comportamento entre dois pontos de Dirac na interação bicamada.

A determinação das simetrias e invariantes de Noether depende de um lagrangiano específico. Um lagrangiano equivalente levaria a diferentes simetrias e constantes de movimento de Noether. Isto contrasta com a investigação direta das simetrias de Lie, por exemplo, que não depende de um formalismo variacional específico. No entanto, as simetrias de Noether têm interesse por si só, como mostram inúmeras aplicações. Para um relato recente sobre o impacto do teorema de Noether na física matemática, veja, por exemplo. [70].

A realização da álgebra de simetria apresentada foi obtida em termos de uma solução particular para g_1 , da equação linear (4.3b), juntamente com g_2 , que é encontrada a partir de g_1 após uma quadratura. De qualquer forma, as assíntotas do campo de calibre ϕ , sempre reproduzem em $t = 0$ um ponto de singularidade da equação do OHDT, Eq. (4.3b), tanto que as soluções exatas são difíceis de se obter. A equação linear de terceira ordem fundamental, dada na Eq. (4.3a), também foi apresentada como solúvel a partir da função quadrática de $g_{1,2}$, bem como na Eq. (4.19). Neste contexto, isto permite ignorar a equação (não-linear) de Pinney, como forma de opção.

De acordo com [53], sistemas integráveis correspondem à exceção e, portanto, sistemas de equações diferenciais não-lineares cuja solução é exata também o são. O grupo 5-dimensional das simetrias pontuais de Noether, como subgrupo do grupo de Lie 8-dimensional máximo $\mathfrak{sl}(3, \mathbb{R})$, também é um subgrupo normal. Embora não se tenha obtido a solução exata, ainda assim se observa que em termos do lagrangiano L , dado pela Eq. (2.13), tem-se que q e $p = \dot{q} - \phi q$ atuam diretamente no vórtice do spin de Dirac, detalhados em [7], o que não é o caso se a discussão é feita em termos do lagrangiano padrão \mathcal{L} para o OHDT, dada pela Eq. (4.29).

Os invariantes de Noether do modelo de Jackiw-Pi, obtidos na Eq. (4.31), representam as constantes de todo o sistema do modelo estudado, apresentando determinados valores constantes e relações entre si. Além disso, caracterizam as estabilidades deste sistema em termos de equações que definem um OHDT. Não há um significado físico explícito. O que temos é a caracterização do comportamento oscilatório do sistema, podendo avaliar diferentes grandezas físicas como o campo elétrico, campo magnético ou posição de carga, por exemplo.

A aplicação dos mesmos métodos podem ser uma abordagem produtiva para problemas similares, tais como o de submeter a bicamada de grafeno a um campo magnético externo [71], sugerindo trabalhos futuros. A análise sobre \ddot{q} não-nula para simetrias dinâmicas permanece em aberto. E uma outra questão é sobre quais resultados podem ser obtidos ao submeter o sistema à geradores de simetria construídos sob um grupos transformações de Lorentz, ignorados nas construções deste trabalho. Segundo [12, 10, 19, 3], há indícios de efeitos relativísticos ao se observar determinadas equações como as que resultam nas Eqs. (1.23) e (1.24).

REFERÊNCIAS

- [1] LEMOS, N.A. **Mecânica Analítica**. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
 - [2] MARTINS, A. S. Simetrias e Leis de Conservação na Mecânica Clássica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, n. 1, p. 33–39, 1999.
 - [3] NOVOSELOV, K. S., GEIM, A. K. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. **Phys. Rev. Lett**, Kluwer, v. 404, p. 3824, 2000.
 - [4] BOEHM, H. P.; SETTON, R.; STUMPP, E. International union of pure and applied chemistry inorganic chemistry division commission on high temperature and solid state chemistry* nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds. **Pure and Applied Chemistry**, v. 66, n. 9, p. 1893–1901, 1994.
 - [5] NOVOSELOV, K. S. et al. A roadmap for graphene. **Nature**, v. 490, n. 7419, p. 192–200, out. 2012.
 - [6] ZHANG, Y. et al. Experimental Observation of Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene. **Nature**, v. 438, p. 247–256, 2005.
 - [7] JACKIW, R.; PI, S. Y. Persistence of zero modes in a gauged Dirac model for bilayer graphene. **Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics**, v. 78, n. 13, p. 1–3, 2008.
 - [8] NOETHER, E. Invariante Variationsprobleme. ger. **Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse**, v. 1918, p. 235–257, 1918.
 - [9] HAAS, Fernando. Noether symmetries and conservation laws of a reduced gauged bilayer graphene model. **Physics Letters A**, v. 482, p. 129034, 2023.
 - [10] CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 81, p. 109–162, 2009.
 - [11] SERADJEH, B.; WEBER, H.; FRANZ, M. Vortices, zero modes and fractionalization in the bilayer-graphene exciton condensate. **Physical Review Letters**, v. 101, p. 246404, 2008.
 - [12] JACKIW, R.; SCHRIEFFER, J. R. Solitons with fermion number $1/2$ in condensed matter and relativistic field theories. **Nuclear Physics, Section B**, v. 190, n. 2, p. 253–265, 1981.
-

- [13] KHMELNYTSKAYA, K. V.; ROSU, H. C. An amplitude-phase (Ermakov-Lewis) approach for the Jackiw-Pi model of bilayer graphene. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 42, p. 1–12, 2009.
- [14] PINNEY, Edmund. The nonlinear differential equation $\ddot{y} + p(x)y + cy^{-3} = 0$. **Proceedings of the American Mathematical Society**, v. 1, n. 5, p. 681, 1950.
- [15] SARLET, W.; CANTRIJN, F. Generalizations of Noethers Theorem in Classical Mechanics. **Siam Review**, v. 23, p. 467–494, 1981.
- [16] VIEIRA, S J. E. D.; VILAR, E. O. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Revista Eletrônica de Mteriais e Processos**, v. 11, p. 54, 2016.
- [17] GREINER, W. **Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations**. New York: Springer, 2000.
- [18] ASHCROFT, N.W.; MERMIN, N.D. **Solid State Physics**. Fort Worth: Saunders College Publishing, 1976.
- [19] ENOKI, T.; ANDO, T. **Electronic properties of nanographene**. Singapore: Pan Stanford Publishing, 2013.
- [20] ARAÚJO, F. R. V. et al. Análogos eletrônicos de dispositivos ópticos em grafeno: da junção p-n à lente de Veselago. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 44, e20220132, 2022.
- [21] PAULING, L. **The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry**. Ithaca, New York: Cornell University Press, 1960.
- [22] MEYER, J.; GEIM, A.; KATSNELSON, M., et al. The structure of suspended graphene sheets. **Nature**, v. 446, n. 7131, p. 60–63, 2007.
- [23] ASBÓTH, J. K.; OROSZLÁNY, L.; PÁLYI, A. **A Short Course on Topological Insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions**. Budapest: Springer, 2015.
- [24] NOVOSELOV, K.S.; GEIM, A.K. Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene K.S. **IOSR Journal of Applied Chemistry**, v. 6, n. 4, p. 45–52, 2013.
- [25] SAKURAI, J. J. **Modern quantum mechanics; rev. ed.** Reading, MA: Addison-Wesley, 1994.
- [26] IBACH, H.; LÜTH, H. **Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science**. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009.
- [27] HOU, C. Y.; CHAMON, C.; MUDRY, C. Electron fractionalization in two-dimensional graphene like structures. **Phys. Rev. Lett.**, v. 98, n. 18, 2007.
-

- [28] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. **Phys. Rev.**, v. 71, 476 and 622–634, 1947.
- [29] SHON, N. H.; ANDO, T. Quantum transport in two-dimensional graphite system. **J. Phys. Soc. Jpn.**, v. 67, p. 2421–2429, 1998.
- [30] COOPER, D. R. et.al. Experimental Review of Graphene. **ISRN Condensed Matter Physics**, v. 2012, p. 1–56, 2012.
- [31] MCCANN, E.; KOSHINO, M. The electronic properties of bilayer graphene. **Rep. Prog. Phys.**, v. 76, n. 5, p. 1–31, 2013.
- [32] KOSHINO, M.; ANDO, T. Orbital magnetism of Dirac systems. **J. Phys.: Conf. Ser.**, v. 334, n. 1, 2011.
- [33] PORTA, M. **A lattice gauge theory model for graphene**. 2011. Tese (Doutorado) – Sapienza, University of Rome, Rome. Defended on 4 February 2011.
- [34] BJÖRKMAN, T. et al. Van der Waals bonding in layered compounds from advanced density-functional first-principles calculations. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 23, p. 235502, 2012.
- [35] SEMENOFF, G. W. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 53, p. 2449–2452, dez. 1984.
- [36] QI, L. et al. Quaternion Matrix Optimization and The Underlying Calculus. **Math. Optimization and Control**, n. 11971294, p. 1–25, 2020.
- [37] IKRAMOV, K. D. Hamiltonian square roots of skew-Hamiltonian matrices revisited. **Linear Algebra and its Applications**, v. 325, n. 1, p. 101–107, 2001.
- [38] NAKAHARA, M. **Geometry, Topology and Physics**. Philadelphia: IoP, 2012.
- [39] GULL, S.; LASENBY, A.; DORAN, C. Imaginary numbers are not real-The geometric algebra of spacetime. **Foundations of Physics**, v. 23, n. 9, p. 1175–1201, 1993.
- [40] AMARAL, B.; BARAVIERA, A; CUNHA, M. O. Mecânica Quântica para Matemáticos em Formação: 28º Colóquio Brasileiro de Matemática. **IMPA**, Rio de Janeiro, RJ, 2011.
- [41] KOTOSONOV, A. S. Diamagnetism of quasi-two-dimensional graphites. **JETP Lett.**, v. 43, 1986.
- [42] KHORDAD, R.; RASTEGAR SEDEHI, H.R. Magnetic susceptibility of graphene in non-commutative phase-space: Extensive and non-extensive entropy. **Eur. Phys. J. Plus**, v. 134, n. 4, p. 1–9, 2019.
- [43] LEWIS, H. R. Classical and Quantum Systems with Time-Dependent Harmonic-Oscillator-Type Hamiltonians. **Physical Review Letters**, v. 18, p. 510–512, 1967.
- [44] HAWKINS R.M.; LIDSEY, J.E. Ermakov-Pinney equation in scalar field cosmologies. **Phys. Rev. D**, v. 66, p. 023522, 2002.
-

- [45] HAAS, F. The damped Pinney equation and its applications to dissipative quantum mechanics. **Physica Scripta**, v. 81, p. 025004, 2010.
- [46] CRAGGS, J. W. **Applied Mathematical Sciences**. 1973. v. 57.
- [47] ROGERS, C.; RAMGULAM, U. A non-linear superposition principle and Lie group invariance: application in rotating shallow water wave theory. **Int. J. Non-Linear Mech., Norwich**, v. 24, n. 3, p. 229–236, jul. 1989.
- [48] BLUMAN G. W. COLE, J. D. **Similarity methods for differential equations**. New York: Springer Verlag, 1974.
- [49] OLVER, P. J. **Applications of Lie groups to differential equations**. Berlin: Springer-Verlag, 1986.
- [50] ARNOLD, V.I. **Mathematical methods of classical mechanics**. New York: Springer, 1989. v. 6.
- [51] GOLDSTEIN, H. **Classical Mechanics**. New York: Addison-Wesley, 1980.
- [52] LIE, S. **Vorlesungen über Differentialgleichungen mit bekannten infinitesimalen Transformationen**. Teubner, Leipzig, 1891: Reprinted by Chelsea, New York, 1967.
- [53] AUDIN, M. **Spinning tops: a course on integrable systems**. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- [54] HAAS, F. **Sistemas de Ermakov Generalizados, Simetrias e Invariantes Exatos**. 1998. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre. 1997.
- [55] BARROS, I.Q.; GARCIA, M.V.A. **Mecânica Analítica**. São Paulo: Edgar Blücher, Ltda., 1995.
- [56] SHU, D. SIMBOTIN, I., CÔTÉ, R.. Integral representation for scattering phase shifts via the phase-amplitude approach. **Phys. Rev. A**, v. 97, n. 2, p. 1–10, 2018.
- [57] LEONE, R.; HAAS, F. Linearity. **Eur. J. Phys**, v. 38, p. 45005, 2017.
- [58] LEACH, P. G. L. The complete symmetry group of the one-dimensional time-dependent harmonic oscillator. **Journal of Mathematical Physics**, v. 21, p. 300, 1980.
- [59] CARIÑENA, J. F.; GÜNGÖR, F.; TORRES, P. J. Invariance of second order ordinary differential equations under two-dimensional and subalgebras of Ermakov-Pinney Lie algebra. **J. Nonl.Anal.**, n. 199, p. 1–18, 2020.
- [60] MANCAS, S. C.; ROSU, H. Ermakov-Lewis invariants and Reid systems. **Phys. Rev. A**, n. 30-31, p. 2113–2117, 2014.
- [61] WULFMAN, C.E.; WYBOURNE, B.G. The Lie group of Newtons and Lagranges equations for the harmonic oscillator. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 9, p. 507–518, 1976.
-

- [62] LUCAS, J.; SARDÓN, C. **A Guide to Lie systems with Compatible Geometric Structures**. Singapore: World Scientific, 2020.
- [63] WINTERNITZ, P. **Lie groups and solutions of nonlinear differential equations, in: Nonlinear Phenomena, Lect. Notes Phys.** Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1983.
- [64] CARIÑENA, J. F.; LUCAS, J. A nonlinear superposition rule for solutions of MilnePinney equation. **Phys. Lett. A**, v. 372, n. 372, 5385, p. 5385–5389, 2008.
- [65] CARIÑENA, J. F.; LUCAS, J.; RAÑADA, M. F. Recent applications of the theory of Lie systems in Ermakov systems. **Sigma** **4**, n. 031, p. 31, 2008.
- [66] BELMONTE-BEITIA, J. et al. Lie symmetries and solitons in nonlinear systems with spatially inhomogeneous nonlinearities. **Phys. Rev. Lett.**, v. 98, n. 6, p. 064102, 2007.
- [67] BELMONTE-BEITIA, J. et al. Lie symmetries, qualitative analysis and exact solutions of nonlinear Schrödinger equations with inhomogeneous nonlinearities. **Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B.**, n. 9, p. 221–233, 2008.
- [68] A. PALIATHANASIS, G. LEON; LEACH, P.G.L.. Symmetries and conservation laws for the generalized n-dimensional Ermakov system. **Math. Methods in the Applied Sciences.**, n. 45, 10710, p. 10710–10717, 2022.
- [69] MANTON, N.; SUTCLIFFE, P. **Topological Solitons Cambridge Monographs on Mathematical Physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [70] LEACH, P. G. L.; PALIATHANASIS, A. (Eds.). Noethers Theorem and Symmetry. **Symmetry**, v. 10, n. 12, p. 1–23, 2020.
- [71] KURU, S; NEGRO, J.; NIETO, L. M. Exact analytic solutions for a Dirac electron moving in graphene under magnetic fields. **Journal of Physics Condensed Matter**, v. 21, n. 45, p. 455305, 2009.
-