



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA

MARCOS FAUSTINO DE SOUSA

Estudo do Grafeno na Presença de Desclinações

Campina Grande, PB

2019

MARCOS FAUSTINO DE SOUSA

ESTUDO DO GRAFENO NA PRESENÇA DE DESCLINAÇÕES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos.

Coorientador: Dr. Gabriel Queiroz Garcia

Campina Grande - PB

2019

S725e Sousa, Marcos Faustino.
Estudo do grafeno na presença de desclinações / Marcos Faustino de Sousa. - Campina Grande, 2020.
94 f. : il. Color.

Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciência e Tecnologia, 2020.
"Orientação: Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos, Prof. Dr. Gabriel Queiroz Garcia".

Referências.

1. Grafeno. 2. Declinação. 3. Fase de Berry. 4. Equação de Dirac. 5. Níveis de Landau. I. Passos, Eduardo Marcos Rodrigues dos. II. Garcia, Gabriel Queiroz. III. Título.

CDU 537 (043)

MARCOS FAUSTINO DE SOUSA

ESTUDO DO GRAFENO NA PRESENÇA DE DESCLINAÇÕES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Física

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos
Unidade Acadêmica de Física - UAF/UFCCG
Orientador

Dr. Gabriel Queiroz Garcia
Unidade Acadêmica de Física - UAF/UFCCG
Coorientador

Prof. Dr. Lincoln Rodrigues Samapaio de Araújo
Unidade Acadêmica de Física - UAF/UFCCG
Examinador interno

Prof. Dr. Alex da Silva
Departamento de Física - DF/UEPB
Examinador Externo

Campina Grande - PB 2019

*Dedico este trabalho a Deus, autor da minha história;
e a minha família, fonte de apoio e carinho.*

Agradecimentos

Agradeço com carinho especial à minha esposa Ruticleia, minha filha Eloah Sophie, minha mãe Maria Faustina (Zélia), meu pai João, meus irmãos Francisco e Maycon, por acreditarem em mim, motivando-me, na minha capacidade e habilidade e, renúncia feitas para que essa vitória fosse alcançada. Essa conquista tenha certeza que também é de todos vocês.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos e ao meu co-orientador Dr. Gabriel Garcia Queiroz, que com entusiasmo, dedicação e paciência, prestando auxílio, e amizade, sem os quais, com certeza, não seria possível finalizar essa dissertação.

A todos os professores do UAF/UFCG, nas pessoas do Prof. Dr. Francisco Brito, Prof. Dr. João Rafael, Prof. Dr. Bertulio, Prof. Dr. Marcos Anacleto, e a todos os demais professores se sintam abraçados, pois todos ajudaram-me transmitindo os seus conhecimentos, sem esquecer do secretário da pós-graduação o senhor Elil sempre atencioso e prestativo. Agradeço aos meus amigos, Rubens Raimundo, Bruno Rêgo, Joeslei Lopes, Marconis, amizade de longa data, desde da graduação, me deram força pra continuar, Almir e Ângelo amigos feitos durante o mestrado, e a todos os demais colegas.

Agradeço também aos irmãos da Igreja Presbiteriana de Picos por suas orações e intercessões por minha vida, saibam que serei eternamente grato.

E por fim a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela bolsa de fomento, sem a qual seria inviável a realização do Mestrado.

*"Para que, no tempo que vos resta na carne,
já não vivais de acordo com as paixões dos homens,
mas segundo a vontade de Deus."*

1 Pedro 4:2

Resumo

O grafeno é um cristal bidimensional que consiste de uma rede hexagonal de átomos carbono, sendo formada por duas sub-redes. As propriedades eletrônicas surgem como consequência da linearidade na relação de dispersão dos portadores de carga, os pontos de Dirac. No limite de baixas energias, o grafeno pode ser descrito por uma teoria de férmions livres sem massa, assim, usamos a equação de Dirac na representação de Weyl em $(2 + 1)$ -dimensões do espaço-tempo. Neste trabalho, usamos a teoria da elasticidade clássica, para introduzir desclinações, em analogia com a descrição geométrica do espaço curvo e o método de *tight-binding* para uma abordagem específica de redes de grafeno. Observamos que o elétron interagindo com pontos de Fermi, se comporta como uma partícula efetiva (ou quasipartícula) no qual na presença da desclinação adquire uma fase de Berry. Consideramos uma métrica Riemanianna a qual representa a geometria curva do grafeno, e introduzimos um campo de calibre não-Abeliano devido a presença de desclinação. Além disso, estudamos a influência de um campo magnético externo sobre os níveis de energia do grafeno. Finalmente, encontramos o análogo dos níveis de Landau para o grafeno na presença do defeito e do campo magnético externo no sentido de verificar possíveis quebras na degenerescência.

Palavras-chave: Grafeno. Desclinação. Fase de Berry. Equação de Dirac. Níveis de Landau.

Abstract

Graphene is a two-dimensional crystal consisting of a hexagonal network of carbon atoms, consisting of two subnetworks. The electronic properties arise as a consequence of the linearity in the dispersion relation of the load carriers, the Dirac points. At the low-power limit, graphene can be described by a theory of free massless fermions, so we use the Dirac equation in Weyl's representation in $(2 + 1)$ -dimensions of space-time. In this work, we use the theory of classical elasticity, to introduce slope, in analogy with the geometric description of the curved space and the *tight-binding* method for a specific approach of graphene networks. We observed that the electron interacting with fermi points behaves as an effective particle (or quasiparticle) in which in the presence of the declination it acquires a phase of Berry. We consider a Riemannian metric which represents the curved geometry of the graphene, and introduce a non-abelian caliber field due to the presence of declination. In addition, we study the influence of an external magnetic field on the energy levels of graphene. Finally, we find the analogue of the Landau levels for graphene in the presence of the defect and the external magnetic field in order to verify possible breaks in the degeneracy.

Keywords: Graphene > Disclinations. Berry Phase. Dirac Equation. Landau Levels.

Sumário

1	Introdução	1
2	Grafeno e Defeitos Topológicos	4
2.1	O tomo de Carbono e a Hibridização sp^2	4
2.2	Estrutura Cristalina e Eletrônica do Grafeno e o Espectro de Energia Para Orbitais π	9
2.3	Defeitos em Cristais	15
2.3.1	A teoria de Eisntein-Cartan	17
2.3.2	Referenciais locais	20
2.3.3	Defeitos topológicos	23
3	Fase de Berry	27
3.1	Processos Adiabáticos	29
3.2	Fases geométricas	32
3.3	A fase quântica de Berry - Efeito Aharonov-Bohm	35
4	Grafeno na presença de desclinações sobre a ação de um campo magnético externo	39
4.1	Motivação	39
4.2	Abordagem geométrica cônica e a equação de Dirac sem massa no espaço-tempo curvo	42
4.3	Comportamento Assintótico da função hipergeométrica confluyente e os Níveis de Landau	50
5	Conclusão	52
A	Teorema de Bloch	54
	Bibliografia	55

Capítulo 1

Introdução

A Física do Estado Sólido (FES), em uma de suas especialidades, a dinâmica de elétrons em estruturas cristalinas. O estudo da FES é um prolongamento da Física Atômica (FA) que teve seu início na década 1910 com o físico Niels Bohr, ensinando como calcular os órbitas dos elétrons no seu interior, posteriormente com a descoberta da difração dos Raios-x e alguns cálculos, a FA teve vários avanços. A partir dessa perspectiva vários cristais foram estudados entre eles cristais bidimensionais (2D). O trabalho publicado por Landau e Peierls em 1937, as flutuações térmicas em redes cristalinas em 2D aduzia deslocamentos atômicos, tornando-se compatíveis às distâncias interatômicas em qualquer temperatura finita. Mas tarde, em 1966 e 1968, Mermin e Wagner afirmaram que não seria possível existir ordem magnética em 1D ou 2D, e generalizaram para sistemas bidimensionais com simetria contínua, com isso admitindo a não existência de formação cristalina em duas dimensões. Com base em um trabalho publicado por Landau e Peierls imaginava-se que seria impossível a existência de materiais cristalinos formados de carbono por serem [2] instáveis termodinamicamente. O grafeno, entretanto foi o primeiro material bidimensional descoberto experimentalmente em 2004, pelo cientistas Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov [1] da Universidade de Manchester, através de uma técnica chamada de clivagem micromecânica, o feito lhes rendeu o Prêmio Nobel em Física de 2010.

O grafeno além de possuir também uma alta qualidade cristalina, é formado de uma monocamada plana de átomos de carbono, e considerado como 2D por ter espessura de um elétron, organizados em células hexagonais com átomos hibridizados na forma sp^2 , ocasionando em um elétron livre por átomo de carbono no orbital p e transformando o grafeno em um material utilizável em várias aplicações. Sua estrutura única proporciona ao grafeno inúmeras propriedades superiores, apresentando uma alta condutividade elétrica e térmica, boa transparência chegando à 98%, boa resistência mecânica, flexibilidade inerente e sua área superficial específica é muito grande [3]. Além de todas essas características, o grafeno ainda é um material 100

vezes mais forte que o aço [4], em condução de calor se comporta 10 vezes melhor que o cobre e excepcionalmente flexível. É impressionante, pois ele combina fragilidade com ductilidade e é impermeável a gases, decorrência da ligação carbono-carbono. Sendo uma das formas cristalinas do carbono, assim como o grafite (3D), os nanotubos (1D) e o fulereno (0D; os elétrons ficam aprisionados no seu interior, tendo zero graus de liberdade), a Fig. 1 mostra a relação entre esses materiais.

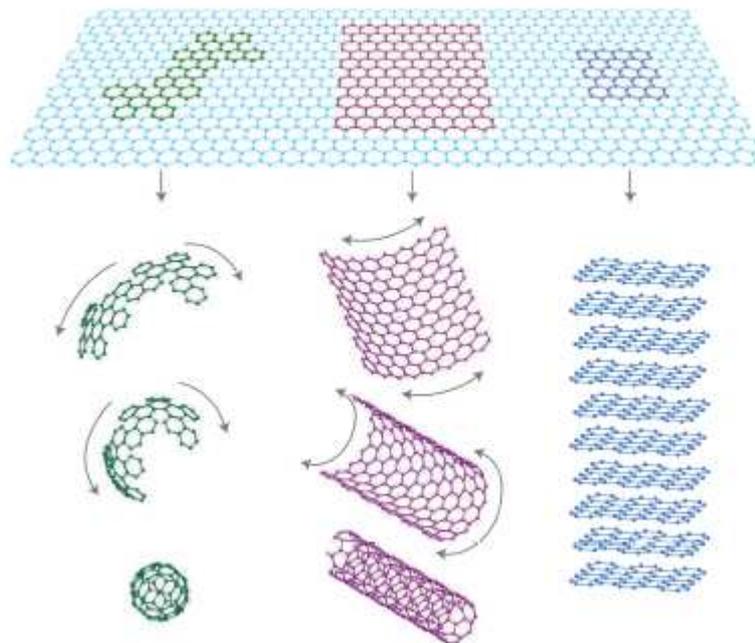


Figura 1.1: Representação gráfica do Grafeno (acima) como material de construção 2D para outras matérias de carbono de outras dimensionalidades: o Fulereno, o nanotubo e grafite (da esquerda para a direita) Ref.[6].

Os efeitos de aplicação são incontáveis, podemos relacionar as inúmeras propriedades apresentadas. As aplicações em circuitos eletrônicos cada vez menores e mais eficientes, células solares (custo/rendimento), sensores de gases e cristais líquidos [7], dentre os estudos desenvolvidos com o grafeno existem também alguns trabalhos que visam sua aplicação do material em uma nova espécie de cabo de transmissão de dados para a internet. Há pouco tempo, testes foram realizados a fim de substituir os semicondutores pelo grafeno devido à sua altíssima eficiência, comparando ambos. Cada vez mais pesquisadores e cientistas se debruçam no estudo e aplicação do grafeno, devido ao seu potencial. Outra aplicação, como purificar a água, transformando a água salgada em potável, a ideia é simples, porém muito útil e segue os princípios dos filtros tradicionais. Foi criado por pesquisadores do Massachusetts Institute of Technology (MIT), a água salgada é colocada para passar por dentro de um filtro extremamente fino cons-

truído com grafeno. Somente as moléculas do líquido passam, retendo todo o sal presente. E se mostro eficiente na hora de eliminar outros elementos da água, inclusive a radioatividade. E nessas inúmeras aplicações com grafeno temos ainda baterias, chips, se mostrando um material com potencial de uso praticamente infinito.

O objetivo desta dissertação é de estudar os efeitos de um defeito topológico, tipo desclinação, em uma rede hexagonal de grafeno na presença de um campo magnético externo. Em específico, obtemos níveis de Landau análogos para o grafeno com tais configurações. Para tal, nos baseamos no modelo geométrico para defeitos topológicos em sólidos elásticos de Katanavaev e Volovich [33], onde os defeitos são representados por métricas que incorporam as condições de contorno associadas a elas. Neste contexto geométrico, usamos a teoria da massa efetiva, que descreve o espectro eletrônico de grafeno no nível de Fermi, usando a equação de Dirac sem massa. Nessa abordagem, observamos que a presença do desclinação quebra a degeneração dos níveis análogos de Landau.

No Capítulo 1 discutimos o átomo de carbono e sua hibridização, será apresentado a estrutura cristalina e eletrônica do grafeno, faremos o cálculo do espectro de energia para os orbitais π a partir do método *tight-binding*, usando o teorema de Bloch para escrever os auto-estados do hamiltoniano da rede. Analisando o comportamento da relação de dispersão linear próximo aos pontos de Fermi (K, K'), constatando e comparação a semelhança entre excitações no grafeno e os Férmions de Dirac, mostrando que o equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com $(2 + 1)$ dimensões, pode descrever o sistema. Ressaltamos ainda, alguns tipos de defeitos topológicos, as deslocções que são descritas contendo curvatura nula, porém com torção não nula, por outro modo temos as desclinações (tipo de defeito abordado nesse trabalho) que é descrita contendo curvatura não nula e torção zero. Tanto as deslocções e as desclinações apresentam dois tipos: negativas e positivas.

No Capítulo 2, vamos apresentar a fase de Barry. Abordamos o processo adiabático, mostrando que uma partícula ao circular um defeito surge naturalmente uma fase, apresentamos que a geometria do sistema é a causa disso, a qual obedece a uma transformação de calibre ou de *gauge*. Por último, apresentamos o efeito Aharonov-Bohm como um exemplo de uma fase geométrica. No capítulo 3, mostramos que o grafeno é um material de uma incrível versatilidade na formação de morfologias, textuais e estruturais. Abordaremos a geometria cônica, onde surge uma fase de Berry. Encontramos os níveis de Landau quando resolvermos a equação de Dirac sem massa para o espaço-tempo curvo, acrescida de um termo de *gauge* não-Abeliano, acoplada com um campo magnético, assim, obtemos a energia do sistema. Finalmente, concluímos apresentando os resultados observados e as futuras perspectivas.

Capítulo 2

Grafeno e Defeitos Topológicos

Nesse capítulo, discutiremos sobre o carbono e apresentamos as propriedades estruturais e eletrônicas do grafeno, fazendo uma revisão do cálculo do espectro de energia para os orbitais π a partir do modelo *tight-binding*, usando o Teorema de Bloch para escrever os auto-estados do hamiltoniano da rede. Em seguida, há uma breve discussão sobre as observações apresentando sobre a semelhança precisa entre o grafeno e os férmions de Dirac, de modo que podemos descrever o grafeno através da equação de Dirac sem massa num espaço-tempo com $2 + 1$ dimensões.

2.1 O tomo de Carbono e a Hibridização sp^2

O carbono é conhecido muito antes da invenção da escrita, aproximadamente 3500 a.C. denominada Idade da Pedra, na forma de carvão vegetal, objeto utilizado em pinturas de cavernas. Ele é o quarto elemento químico mais abundante no Universo, é o decimo quinto na crosta terrestre e é segundo elemento mais abundante em massa no corpo humano (cerca de 18,5%) [8] atrás do oxigênio, devido a sua grande capacidade em formar ligações com ele mesmo e outros elementos e pela sua configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^2$, permitindo que ligações químicas entre átomos de carbono sofram a hibridização, assim, surgindo orbitais híbridos sp , sp^2 , sp^3 a partir da mistura de orbitais de subníveis atômicos s e p . Já foram identificados mais de 10 milhões de compostos distintos graças as suas formas alotrópicas. Entre suas formas as mais famosas está o diamante (forma rara, cara e transparente) e o grafite (forma frágil, barata e opaco), e cabe ressaltar que os compostos a base de carbono são a base da vida orgânica em nosso planeta.

Esse nome carbono foi dado por Lavoisier em 1789, vem do latim *carbo*, carvão. No mesmo ano, Werner e Harstem propuseram o nome grafite (do grego "para escrever") para uma de

suas formas alotrópicas. Embora conhecido de longa data, o carbono só veio a ter destaque e reconhecimento como elemento químico através de trabalhos de vários pesquisadores no século XIX. O interesse em estudar as formas alotrópicas do carbono recebeu um grande impulso a partir da década de 1980, quando os fulerenos foram descobertos e fabricados [9]. Em 1996 H. W. Kroto, R. E. Curl e R. E. Smalley foram agraciados com Prêmio Nobel de Química pela descoberta. Até que finalmente em 2004 isolou-se a mais promissora das formas alotrópicas do carbono: o grafeno. Encontra-se na literatura química como uma única camada da estrutura grafítica e pode ser considerada como o último membro da série de naftalenos, antracenos, coronenos, etc., e o termo grafeno deve, portanto, ser utilizado para designar a camada individual de carbono em compostos de intercalação de grafite. O uso do termo "camada de grafeno" é também considerada para a terminologia geral dos carbonos [10].

O grafeno é composto unicamente de átomos de carbono, possuindo seis elétrons e ocupando os orbitais atômicos $1s^2$, $2s^2$ e $2p^2$. Os elétrons do orbital $1s^2$ são fortemente ligados ao núcleo devido à forte ligação entre prótons e elétrons, assim são chamados de elétrons internos, os demais elétrons são denominados elétrons de valência. Na fase cristalina os quatro elétrons de valência dão origem aos orbitais $2s$, $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$. Apresentando uma diferença de energia entre os níveis $2s$ e $2p$, sendo pequena se comparada com a sua energia de ligação química, contudo no processo híbrido as funções de onda desses quatro elétrons se sobrepõem naturalmente. Ocorrendo o processo entre um átomo no orbital $2s$ e dois átomos no orbital $2p$ aparece a hibridização chamada de sp^2 (veja figura 1.1).

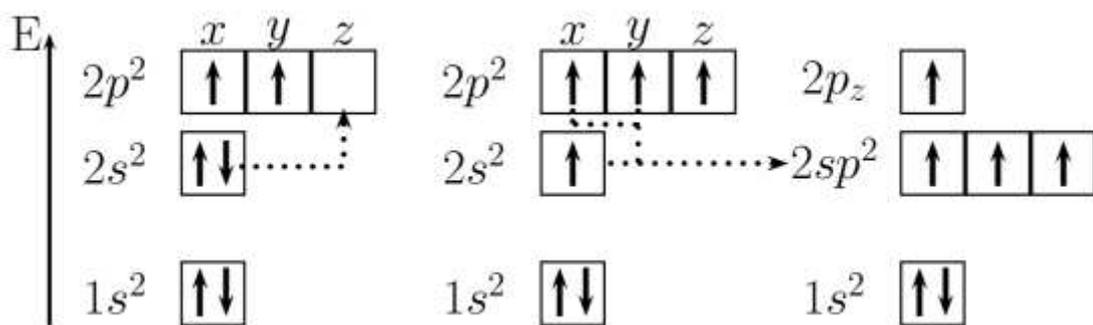


Figura 2.1: Representação do processo de hibridização dos átomos de carbono na formação do grafeno [11]

Nesse processo, um elétron do nível $2s^2$ é transferido para o orbital $2p_z$. Após ocorrer uma combinação linear entre os orbitais $2s$ e o $2p_{xy}$, originando o orbital híbrido $2sp^2$, esses três estados se mantêm no plano x-y com um ângulo de 120° entre eles, formando ligações σ (3

ligações covalentes planares relativamente forte) com os átomos vizinho e essas ligações são as que dão forma da rede hexagonal do grafeno. O orbital $2p_z$ (não hibridizado) fica perpendicular às ligações σ e forma uma ligação π (relativamente mais fraca), sendo responsável pelas propriedades eletrônicas do grafeno [13], ele fica na direção z (podendo ser encontrado tanto em $-z$ como em $+z$).

O grafeno formar uma rede cristalina hexagonal plana, sendo assim, um cristal bidimensional. Ele também é a base de várias outros cristais como o fulereno e nanotubo de carbono, sendo possível através do embrulhamento da folha de grafeno com uma estrutura de zero-dimensão¹ (0D) com aparência à uma bola e o enrolamento da folha de grafeno com uma estrutura unidimensional² (1D), respectivamente [6](veja a Fig.1).

É um material em extrema ascensão, e isso ocorre em diversas áreas da ciência, e tem tido um olhar especial em ciências dos materiais e física da matéria condensada. É fácil compreender as inúmeras pesquisas desenvolvidas hoje em relação ao grafeno, tem um leque de aplicação na área tecnológica, suas propriedades isoladas e combinadas tornam possível a construção de cristais líquidos a base de grafeno [14], células solares com menor custo e maior rendimento [15], sua alta potencialidade de aplicação em dispositivos eletrônicos de alta frequência [16], eletrônicos flexíveis e melhor desempenho é de empolgar qualquer pesquisador, passando a ser considerado com um super material. Por exemplo, a Nokia estuda desde 2006 identificando várias supostas aplicações e patenteou seu uso em sensores de câmeras. O maior foco é sua aplicação nos celulares da marca. Em 2013, o diretor da Nokia anunciou um investimento de 2,7 bilhões de reais nas pesquisas com grafeno, mostrando a importância. Aqui no Brasil a Universidade Mackenzie lidera as pesquisas experimentais, em 2013 foi anunciado um investimento inicial de 20 milhões de reais na construção de um centro de pesquisas de grafeno, chamado de Mackgrafe - Centro de Pesquisas Avançadas em Grafeno, Nanomateriais e Nanotecnologias. Até então o maior investimento que uma instituição de ensino superior privada já fez [17]. E no início deste ano, a empresa Dini Têxtil investiu 10 milhões em colaboração com o centro de pesquisas Mackgrafe, o intuito é explorar as possibilidades do grafeno na área têxtil para bancos de carros [18].

As propriedades do grafeno são peculiares, ao comparado com uma folha de aço onde a sua resistência à ruptura é de $42N/m$, ou seja, sua força de ruptura é $0,40N/m$, chegando a ser 100 vezes mais forte [4]; praticamente transparente, absorve apenas 2,3% da intensidade da luz, independe do comprimento de onda óptica, e é determinado único e exclusivamente pela constante da estrutura fina [3]; tem uma condutividade maior que o do cobre

¹Os elétrons ficam aprisionados no seu interior com zero grau de liberdade.

²Como um fio oco, os elétrons possui apenas um grau de liberdade.

que é $0,60 \times 10^6 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, tendo sua condutividade elétrica $0,96 \times 10^6 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, traduzindo-se em um excelente condutor, isso em uma camada de grafeno; em temperatura ambiente, é dominada por fônons, a condutividade térmica do grafeno é próximo de 5000W/mK , fazendo o comparativo com o cobre que tem uma condutividade térmica de 410W/mK , o grafeno conduz o calor quase 13 vezes melhor.

A técnica utilizada por A. Geim e K. Novoselov [1] para obter o grafeno, é chamada de clivagem micromecânica, que lhes renderam o prêmio Nobel de Física de 2010. Tal técnica produz grafeno de altíssima qualidade em termos de integridade estrutural em domínio iônico, com propriedades elétricas e mecânicas quase ideais. Identificaram e caracterizaram o grafeno, por meio do Microscópio de Força Atômica (AFM - Atomic Force Microscopy).

Hoje encontra-se várias formas de produção do grafeno, de modo que pesquisadores ao redor do mundo inteiro iniciaram uma corrida para alcançar novas formas de obtê-lo com maior eficiência e economicamente mais barato. Destacaremos quatro métodos para obtenção do grafeno: clivagem ou esfoliação micromecânica, esfoliação em fase líquida, método de deposição química da fase vapor (CVD) e crescimento de grafeno epitaxial em SiC.

1) Clivagem ou esfoliação micromecânica

O método de clivagem ou esfoliação micromecânica é o mais simples e consiste em aplicar uma fita adesiva em um grafite pirolítico altamente orientado (HOPG), remover a fita contendo o grafite e colocar levemente em cima de um substrato de óxido de silício (SiO_2). O substrato de SiO_2 tem muita aderência, até mesmo maior que o próprio grafeno, a folha de grafeno adere ao substrato. A detecção pode ser observada através de microscópio ótico pois há um contraste entre o substrato e a folha de grafeno.

Através desse método de micro esfoliação é possível gerar grandes pedaços de grafeno, da ordem de até $100 \mu\text{m}$. Este método também o qual são conseguidas as melhores características estruturais e elétricas, pois o grafeno fica mais cristalino. Contudo, o que conta contra esse processo é que na visão industrial ele se torna inviável, devido a sua maneira de obter o grafeno, tornando a busca de outros métodos de produção do grafeno.

2) Esfoliação química em fase líquida a partir do grafite

Esse método consiste em diminuir e quebrar as interações de *stacking* $\pi - \pi$ (interações intermoleculares do tipo empilhamento) contida entre as camadas de grafeno [20]. Se diminui essas interações, usando reagentes colocados entre as camadas. O consumo desses reagentes é interrompido por conta da produção desses gases em alta pressão, a estrutura sofre uma alteração passando de sp^2 para uma de $sp^2 - sp^3$. Essa técnica mostra-se ser versátil, pois usam agentes químicos de fácil acesso como o cloreto de potássio e os ácidos nítrico e sulfúrico ressaltando,

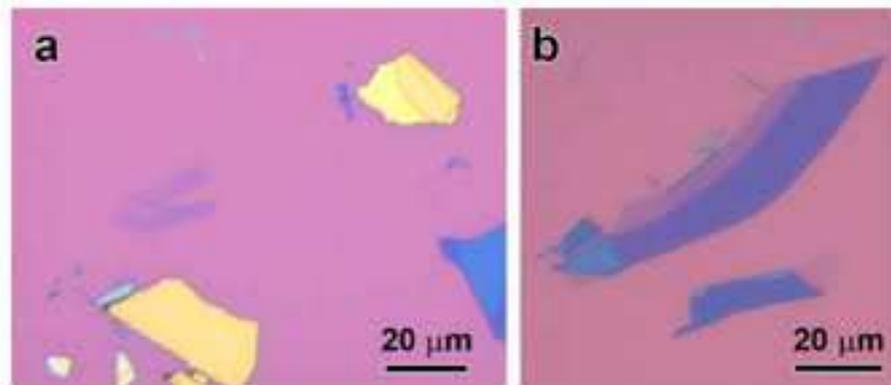


Figura 2.2: Grafeno esfoliado micro mecanicamente. Imagens óticas de (a) grafite, (b) grafeno de poucas camadas (FLG) e grafeno monocamada (contraste púrpura mais claro) numa camada de $SiO_2 \sim 300nm$. Cores amareladas indicam amostras mais espessas (\sim centenas de nm) enquanto contrastes azulados e mais claros indicam amostras mais finas [19].

e que poderia ser realizada em alta escala para a produção do grafeno [19].

3) Processo de obtenção pelo método CVD

Constitui-se em obter grafeno através da deposição química na fase vapor em substratos de cobre. O cobre formar ligações fracas na superfície, possuindo uma configuração eletrônica estável e que tem pouca compatibilidade com o carbono, isso torna-o um material favorável para o crescimento do grafeno em sua superfície. Ao realizar a aplicação de um tratamento térmico na superfície do cobre aplicando gases de argônio e hidrogênio aumentando os grãos do cobre, proporcionando uma superfície mais uniforme. Após o tratamento térmico um gás carbonáceo (acetileno, metano, benzeno, etileno, e etc.) é colocado no forno CVD. O gás então é colocado a altas temperaturas e baixa pressão prendendo ao substrato presente (metal catalisador). Após o crescimento da folha de grafeno, o forno é esfriado para a sua retirada [21].

Esse método com o benefício do custo da amostra ser relativamente baixo, comparado com os demais processos, porém encontra-se uma desvantagem, ele é limitado pelo tamanho da superfície da amostra de cobre. Além do transporte elétrico, os pontos de nucleação do grafeno não apresentam uma orientação única, devido à baixa interação do grafeno ao substrato provocando um espalhamento dos elétrons e por consequência um transporte elétrico de qualidade menor do que é observado em processos onde o grafeno é obtido por esfoliação do grafite.

4) Crescimento de grafeno epitaxial em SiC

Existem inúmeros processos na geração do grafeno nas superfícies do carbeto de silício (SiC). O que se demonstra melhores resultados é o crescimento em pressão atmosférica. Nesse processo a amostra de SiC é colocado dentro de um forno à uma pressão atmosférica em ambi-

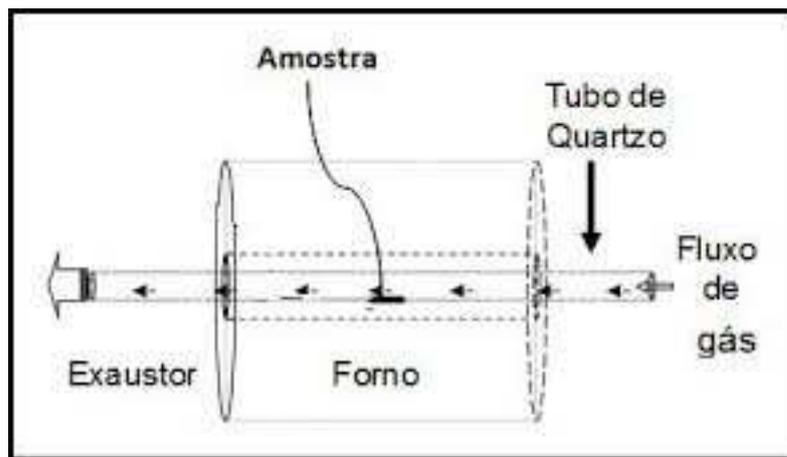


Figura 2.3: Esquema de um sistema CVD [21].

ente contendo argônio. O forno é aquecido até temperaturas que varia entre 1500°C à 2000°C , decorre a sublimação do silício do substrato (Veja a fig. 1.4). As monocamadas do grafeno formadas a partir da reorganização do carbono que então fica depositado sobre a superfície do SiC [22]

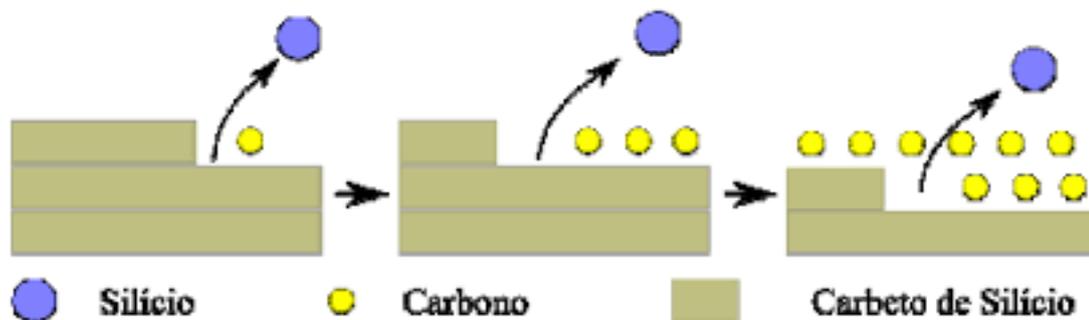


Figura 2.4: Representação do carbeto de silício sublimando e o carbono aliando-se na superfície do substrato [23].

Observa-se bons resultados em relação a qualidade e produção do grafeno, já o custo é uma barreira nesse método, até mesmo em relação aos demais métodos mencionados.

2.2 Estrutura Cristalina e Eletrônica do Grafeno e o Espectro de Energia Para Orbitais π

O grafeno pode ser entendido como uma monocamada de átomos de carbono em uma estrutura cristalina hexagonal, descrito como duas sub-redes triangulares A e B sobrepostas, relacionadas por simetria de inversão. A célula unitária do grafeno é composta por dois átomos,

sendo cada átomo pertencente a uma das sub-rede. Podemos observar (ver Fig. 1.2), a zona de Brillouin do grafeno é um hexágono, possui seis vértices que formam dois grupos diferentes de pontos \vec{K} , denominados de \vec{K} e \vec{K}' (são os "pontos de Dirac").

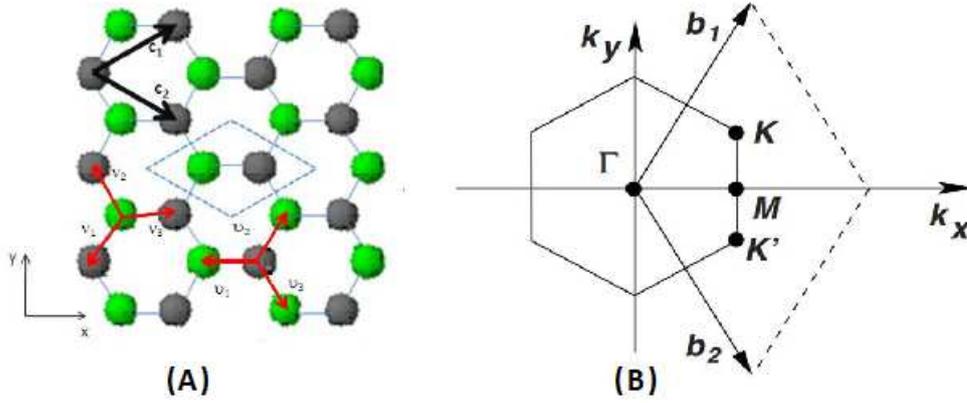


Figura 2.5: (A) Representação da rede de grafeno e das suas sub-redes \mathcal{A} (átomos de carbono de cor cinza) e \mathcal{B} (átomos de carbono de cor verde). Os vetores \vec{c}_1 e \vec{c}_2 são os vetores primitivos da rede real, e os vetores $\vec{u}_{j=1,2,3}$ e $\vec{v}_{j=1,2,3}$ são os vetores dos primeiros vizinhos (onde o j é o índice que rotula os vetores \vec{u} e \vec{v}) e a célula unitária (losango em linhas tracejada) e (B) Vetores da rede recíproca \vec{b}_1 e \vec{b}_2 e a primeira zona de Brillouin do grafeno [24].

Pelo elemento de simetria da rede cristalina, podemos por translação dos vetores da base \vec{c}_1 e \vec{c}_2 conseguir as duas redes de Bravais triangulares, tanto a sub-rede \mathcal{A} gerada pelo vetor $\vec{r}_i = n_i \vec{c}_1 + m_i \vec{c}_2$ e a sub-rede \mathcal{B} gerada pelo vetor $\vec{r}_i = n_i \vec{c}_1 + m_i \vec{c}_2 + \vec{d}$, com n_i e $m_i \in \mathbb{Z}$. Definimos a origem da célula unitária $\vec{d} = d(-1, 0)$, sendo a distância interatômica entre os átomos de carbono dado por $d \approx 1,42\text{\AA}$ e $d_0 = \sqrt{3}d = 2,46\text{\AA}$, a constante da rede. É importante destacar que cada sítio em uma sub-rede interage com os outros três sítios vizinhos da outra sub-rede, isso se dar através dos vetores dos primeiros vizinhos, $\vec{u}_{j=1,2,3}$ e $\vec{v}_{j=1,2,3}$, isso ocorre para o modelo *tight-binding*.

Assim, para uma folha de grafeno perfeita e infinita, podemos escrever os vetores da rede como:

$$\vec{c}_1 = d \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2} \right), \quad (2.1)$$

$$\vec{c}_2 = d \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2} \right), \quad (2.2)$$

onde a origem do sistema está na célula unitária $\vec{d} = d(-1, 0)$, assim teremos os vetores de

primeiros vizinhos,

$$\vec{u}_1 = d(-1, 0), \quad \vec{u}_2 = d\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{u}_3 = d\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad (2.3)$$

$$\vec{v}_1 = d(1, 0), \quad \vec{v}_2 = d\left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{v}_3 = d\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right). \quad (2.4)$$

Assim, como os pontos de Fermi (mostrados na figura 1.2b) são dados da seguinte forma,

$$\vec{K} = \left(\frac{4\pi}{3d\sqrt{3}}\right)(1, 0), \quad \vec{K}' = \left(\frac{4\pi}{3d\sqrt{3}}\right)(-1, 0). \quad (2.5)$$

Esses pontos são importantes nas propriedades de transporte eletrônico do grafeno, propriedades que são determinadas, principalmente, pela natureza do espectro eletrônico em torno desses pontos. A rede cristalina do grafeno é rotacionada 30° no espaço recíproco em relação à rede direta, e a rede cristalina do grafeno possui simetria de inversão espacial ($x; y$) \rightarrow ($-x; -y$) [25].

Os pontos \vec{K} e \vec{K}' são de alta simetria da primeira zona de Brillouin e são muito importantes para o estudo do grafeno, e as coordenadas destes pontos são dadas por:

$$\vec{K}(\vec{K}') = \xi_{\vec{K}(\vec{K}')} \frac{\vec{b}_1 - \vec{b}_2}{3} + m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2, \quad (2.6)$$

onde m e n são números inteiros, $\xi_{\vec{K}} = 1$ e $\xi_{\vec{K}'} = -1$ produzem as posições dos pontos \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente. São chamados de índices de vale [26], os pontos com mesmo ξ são equivalentes.

Utilizaremos o Teorema de Bloch para escrever os auto-estados do hamiltoniano da rede (Teorema de Bloch - apêndice A). Abaixo está enunciado o Teorema de Bloch [27]

Teorema 2.2.1 (Bloch). *O auto-estado ψ do hamiltoniano de um elétron $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$, onde $V(\vec{r} + \vec{R})$ é um potencial periódico, para todo \vec{R} na rede de Bravais, pode ser escolhido ter a forma de uma onda plana multiplicada por uma função contendo a periodicidade da rede Bravais:*

$$\psi_{\vec{k}\vec{r}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.7)$$

onde a periodicidade da função de onda:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.8)$$

As funções de Bloch são invariáveis por translações dos vetores da rede. Sendo possível obter a função de onda de qualquer célula do cristal fazendo uma translação de múltiplos inteiros dos vetores unitários e multiplicar pelo fator de fase $e^{i\vec{k}\vec{R}}$.

No método de *tight – binding*, o hamiltoniano que descreve os orbitais π do carbono, fornece a estrutura eletrônica do grafeno para energias próximo aos pontos de Fermi (pontos de neutralidade de cargas) e que o elétron pode apenas ser transferido do seu sítio para o sítio dos primeiros vizinhos, é dado por [29]:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=A} \sum_{j=1}^3 a^\dagger(\vec{r}_i) b(\vec{r}_i + \vec{u}_j) - t \sum_{i=B} \sum_{j=1}^3 b^\dagger(\vec{r}_i) a(\vec{r}_i + \vec{v}_j). \quad (2.9)$$

O termo t é o fator de *hopping*, ele é responsável pela transferência entre primeiros vizinhos e associado à probabilidade de troca dos elétrons nos orbitais π entre átomos vizinhos, seu valor é $t \approx 2,7 eV$. Temos $a^\dagger(\vec{r}_i)$ o operador de criação de um elétron na sub-rede A, e o operador de aniquilação $a(\vec{r}_i)$ aniquila um elétron na sub-rede A, igualmente temos o operador $b^\dagger(\vec{r}_i)$, cria um elétron na sub-rede B, e o operador $b(\vec{r}_i)$ aniquila um elétron na sub-rede B, e seguem a relação de anticomutação:

$$\{a(\vec{r}_i), a^\dagger(\vec{r}'_i)\} = \{b(\vec{r}_i), b^\dagger(\vec{r}'_i)\} = \delta_{ii'}. \quad (2.10)$$

Devido a periodicidade da rede podemos usar a transformada de Fourier:

$$\tilde{a}(\vec{k}) = \int_{\Gamma} \frac{dx^2}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} a(\vec{r}_i), \quad (2.11)$$

$$\tilde{b}(\vec{k}) = \int_{\Gamma} \frac{dx^2}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} b(\vec{r}_i). \quad (2.12)$$

Sendo possível sair da célula unitária do espaço real para a primeira zona de Brillouin (Γ), onde os vetores são obtidos pela relação de $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, assim nosso hamiltoniano fica:

$$\mathcal{H} = \int_{\Gamma} \frac{dk^2}{(2\pi)^2} \begin{pmatrix} \tilde{a}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{b}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a}(\vec{k}) \\ \tilde{b}(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Resolvendo a equação de autovalores, após ter diagonalizado a matriz que está no interior da integral na eq. (2.13):

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

onde χ_A e χ_B correspondem as componentes do autovetor. Resolvendo o determinante obtemos os autovalores,

$$\det \begin{bmatrix} 0 - E & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_j} & 0 - E \end{bmatrix} = 0. \quad (2.15)$$

Da eq. (2.15) encontramos os autovalores de energia:

$$E^2 = t^2 \sum_{j=i}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}_j} \sum_{j'=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_{j'}}, \quad (2.16)$$

abrindo o somatório, e calculando para todos os sítios que estão ocorrendo as transferências, conseguimos:

$$E = \pm t \sqrt{\underbrace{1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y d\right) + 4\cos\left(\frac{3}{2}k_x d\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y d\right)}_{f(\vec{k})}}. \quad (2.17)$$

A eq. (2.17) nos mostra o espectro de energia do grafeno, o qual consiste de duas bandas de energia: a banda de valência com a superfície com $E(k) < 0$ e a banda de condução com a superfície com $E(k) > 0$, as duas bandas se tocam quando $E = 0$, isso ocorre em seis pontos que se localizam na primeira zona de Brillouin formando um hexágono (Veja a Fig. 1.3) e são justamente os vetores definidos nas eq. (2.5). O espectro é simétrico, $E(k) = E(-k)$ (simetria partícula-buraco), e no estado fundamental a banda de valência está preenchida e a banda de condução está vazia.

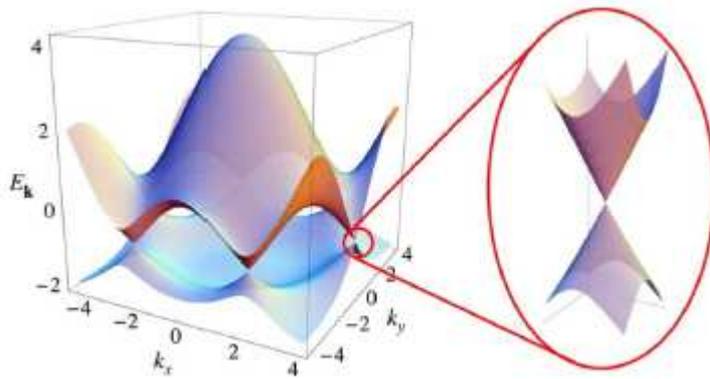


Figura 2.6: Representação da estrutura das bandas do grafeno. Uma ampliação do cone de dirac do grafeno, também conhecidos como pontos de Fermi(K, K'), local onde a banda de valência e a de condução se tocam ($E = 0$) [29].

A Fig. 1.3 intui que o grafeno é um material metálico, mas devido à sua baixa densidade eletrônica próximo dos pontos de Dirac, é considerado como um semicondutor de *gap* nulo (ou zero) [6], sendo sensível à simetria da estrutura, a banda de valência toca a banda de condução em um único ponto; existem apenas dois autovalores de energia para cada ponto \vec{k} dentro da primeira Zona de Brillouin.

A figura acima mostra que os cones de Dirac do grafeno caracterizam o efeito relativístico, observados na escala nanométrica. Devido a periodicidade o número de pontos de Fermi se reduz a dois pontos, sendo pontos equivalentes: $K_{\pm} = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d}\right)$. Ressaltamos que em regimes de baixas energias, os elétrons no grafeno comporta-se como uma partícula sem massa, e a nossa relação de dispersão de energia torna-se praticamente linear, e esse é um dos vários objetivos de estudo desse material.

Fazendo uma expansão do vetor de onda \vec{k} em torno dos pontos K e K' (próximos aos pontos de Fermi) e decompondo \vec{k} em um vetor \vec{K} (\vec{K}') projetando na direção do ponto K (K') e um vetor infinitesimal \vec{q} ,

$$\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}, \quad \vec{k} = \vec{K}' + \vec{q}. \quad (2.18)$$

Os vetores \vec{K} e \vec{K}' foram definidos na eq. (2.5), e também pela fig. (1.3); substituindo o vetor de onda \vec{k} no fator geométrico $f(\vec{k})$ e fazendo uma expansão de 1 ordem em \vec{q} , temos:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= f(\vec{K} + \vec{q}) & (2.19) \\ &= \sum_{\vec{d}_n} e^{-i(\vec{K} + \vec{q}) \cdot \vec{d}_n} \\ &\approx \sum_{\vec{d}_n} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{d}_n} (1 - i\vec{q} \cdot \vec{d}_n) \\ &= \underbrace{\sum_{\vec{d}_n} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{d}_n}}_{=0} - i \sum_{\vec{d}_n} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{d}_n} \vec{q} \cdot \vec{d}_n \\ &\quad - i \sum_{\vec{d}_n} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{d}_n} \vec{q} \cdot \vec{d}_n, & (2.20) \end{aligned}$$

considerando que $\vec{q} \cdot \vec{d}_n \ll 1$, sendo $q \ll \frac{1}{d}$, usando os valores \vec{K} (\vec{K}') (definidos na eq. (2.5)) e o \vec{d}_n (vetores dos primeiros vizinhos \vec{u} e \vec{v} , eqs. (2.3) e (2.4)), obtemos:

para \vec{K} :

$$f(\vec{k}) = \frac{3d}{2}(-q_x + iq_y) = \frac{3d}{2}(-p_x + ip_y), \quad (2.21)$$

para \vec{K}' :

$$f(\vec{k}) = \frac{3d}{2}(-q_x + iq_y) = \frac{3d}{2}(p_x + ip_y). \quad (2.22)$$

Assim, podemos reescrever o hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{\pm} = \frac{3t}{2}d \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

o termo \mathcal{H}_{\pm} é para todo ponto de Fermi, K_+ e K_- , e o parâmetro $v_f = \frac{3t}{2}d$ chamado de velocidade de Fermi, tem o valor de $\approx 10^6 m/s$. A eq. (2.23) fica:

$$\mathcal{H} = -iv_f \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}, \quad (2.24)$$

as matrizes de Pauli $\vec{\sigma}^3$ atuam nas sub-redes do grafeno e são definidas

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Podemos escrever o hamiltoniano do grafeno como uma equação tipo Dirac para férmions sem massa,

$$i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi = 0. \quad (2.26)$$

A equação acima indica que o grafeno é descrito como um sistema de 2+1 dimensão e permite compreender os estados eletrônicos de baixas energias para orbitais π , e que o ψ é o spinor com 4 componentes da equação de Dirac. Relacionado as duas sub-redes e os dois pontos de Fermi e, a velocidade de Fermi faz o papel da velocidade da luz.

A fig. 1.3, mostramos um zoom da estrutura da banda de energia perto de um dos pontos de Dirac (no ponto K ou K' , na primeira zona de Brillouin do grafeno), se percebe que o espectro de energia para momentos pequenos, próximos aos pontos de Fermi, a dispersão de energia é linear, o que caracteriza a dinâmica da equação de Dirac.

2.3 Defeitos em Cristais

A rede cristalina de um sólido em um sistema físico real pode apresentar vários defeitos, assim como, a produção de cristais em laboratórios. Esse aspecto, interpretamos como defeitos na estrutura devido a um evento local em torno de um sítio na rede, e podem ter origem química, elétrica ou estrutural. É importante compreender os defeitos em sólidos, para entender o comportamento de difusão, trasição de fase, transporte eletrônico, reatividade dos compostos em sólidos [31], e sua aplicação na medicina e produção de novos materiais [32].

Considerando um cristal tridimensional ideal, perfeito e infinito onde nenhuma força externa será levada em conta, podemos escrever os sítios da rede desse cristal como,

$$\vec{x} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3. \quad (2.27)$$

³Matrizes introduzidas na mecânica quântica não relativística para descrever partículas de spin-1/2.

Para esse cristal livre de defeitos, sendo \vec{a}_i os vetores da rede e n_i números inteiros. O primeiro passo é definir o sistema de referencial cartesiano em relação a x_i , $i = 1, 2, 3$, as propriedades elásticas não deformadas possuem simetria de rotação e translação, chamado de estado fundamental, assim nesse estado deformado podemos descrever por uma métrica euclidiana plana $\delta_{ij} = \text{diag}(+ + +)$, e a torção nesse meio é igual a zero. O passo seguinte é assumir que forças externas atuam sobre o cristal, onde haverá deformações e os sítios da rede terão uma nova posição, sendo afetados pelo vetor deslocamento $\vec{u}(x) = \vec{u}(x(x'))$, ou seja, após a deformação o ponto x' terá as coordenadas,

$$x'_i = x_i + u_i(x), \quad (2.28)$$

assumimos que os campos dependem das coordenadas x_i que são coordenadas dos pontos do meio após a deformação x'_i e cobrem todo o espaço Euclidiano \mathbb{R}^3 . Após a distorção, o vetor de distância entre dois pontos vizinhos infinitesimal espaçados em x e y é alterado de $dx = x - y$ para

$$dx'_i = dx_i + \partial_j u_i(x) dx_j, \quad (2.29)$$

e seu comprimento é $dl = \sqrt{dx_i^2}$, temos então

$$dl' = (dl^2 + 2\epsilon_{ij} dx_i dx_j)^{1/2}. \quad (2.30)$$

A matriz simétrica ϵ_{ij} denominado como tensor deformação, é dada por

$$\epsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i u_l \partial_j u_l), \quad (2.31)$$

para aproximação linear assumimos que $\partial_j u_i \ll 1$, assim

$$\epsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (2.32)$$

A existência de descontinuidades e singularidades no campo de deslocamento é interpretada como a presença de defeitos no meio elástico, já na ausência de defeito assume-se que o campo de deslocação é suave no espaço \mathbb{R}^3 . As deformações estáticas, quando o campo de deslocamento u_i não depende do tempo. Então as equações básicas de equilíbrio para pequenas deformações serão [33, 34]

$$\partial_i \sigma^{ij} + f^i = 0 \quad (2.33)$$

$$\lambda \delta^{ij} \epsilon_k^k + 2\mu \epsilon^{ij} = \sigma^{ij}, \quad (2.34)$$

onde σ^{ij} é o tensor de tensão, assumido como simétrico. sendo λ e μ constantes e representam as propriedades elásticas do meio, denominados de coeficientes de Lamé. Temos nesse contexto que a eq. (??) equivale a lei de Newton, onde $f^i(x)$ são funções e descrevem a densidade

total das forças não-elásticas distribuídas dentro do meio ($f^j(x) = 0$, atribui a inexistência dessas forças). Já a (2.34) assemelha-se a lei de Hook associando os tensores de tensão e deformação. A métrica euclidiana δ_{ij} e a sua inversa δ^{ij} é responsável pelo levantamento e abaixamento dos índices.

Para o regime de pequenas deformações o levantamento e o abaixamento de índices é frequentemente esquecido, já na presença de defeitos recorreremos a métrica riemanniana para a realização desse procedimento. Considerando translações infinitesimais, que leva do ponto $x^u \rightarrow x'^u$ no espaço-tempo, precisamos da descrição da teoria da elasticidade através de geometria riemanniana. Do ponto de vista matemático, o mapa (2.27) por si só é o difeomorfismo do espaço euclidiano \mathbb{R}^3 . Neste caso, a métrica euclidiana δ_{ij} é induzida pelo mapa $x_i \rightarrow x'_i$. Isso significa que no estado deformado a métrica na aproximação linear será

$$g_{ij}(x) = \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} \frac{\partial x'^l}{\partial x^j} \delta_{kl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\epsilon_{ij}. \quad (2.35)$$

Na aproximação linear $\epsilon_{ij}(x) = \epsilon_{ij}(x')$ e $\partial u_j / \partial x_i = \partial u_j / \partial x'_i$, onde a ultima igualdade é para pequenas deformações. Partindo da equação (2.34) as deformações na rede cristalina podem ser descritas utilizando a geometria diferencial, a qual pode associar deslocamentos com torção e desclinação com curvatura [33].

2.3.1 A teoria de Einstein-Cartan

Lembrando que da RG as quantidades geométricas são construídas com a coxexão afim, $\Gamma_{\mu\alpha}^\beta = \Gamma_{\alpha\mu}^\beta$ sendo simétrica nos índices μ e α . A distância infinitesimal entre dois pontos no espaço-tempo é dada por,

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (2.36)$$

A equação (2.36) é o elemento de linha do espaço-tempo. A métrica $g_{\mu\nu}$ é dada por um tensor covariante de ordem 2, obedece a duas propriedades, a metricidade $g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$ e o seu determinante é não-nulo $|g_{\mu\nu}| \neq 0$, dessa forma, podemos definir a inversa da métrica $g^{\mu\nu}$,

$$g^{\mu\nu} g_{\nu\tau} = \delta_\tau^\mu, \quad (2.37)$$

ou seja, a matriz simétrica $g^{\mu\nu}$ é a matriz inversa de $g_{\mu\nu}$.

Podemos então usar a métrica g para definir um isomorfismo (correspondência biunívoca entre os elementos de dois grupos, que preserva as operações de ambos) entre os tensores covariantes e contravariantes, assim usarmos a métrica para levantar e abaixar índices. Se A^α são as componentes contravariantes de um tensor, então A_α são as componentes covariantes, associados

$$A_\alpha = g_{\alpha\beta} A^\beta \quad e \quad A^\alpha = g^{\alpha\beta} A_\beta \quad (2.38)$$

A assinatura da métrica $g_{\alpha\beta}$ é dada por $(2-n)$, n é a dimensão da variedade e é dita uma métrica de Lorentz. A métrica por ter um caráter Lorentziano nos permite separar os vetores não-nulos da variedade em três classes de acordo com sinal de $g(x, x)$, x é um vetor da variedade. Teremos $g(x, x) = g_{\alpha\beta}x^\alpha x^\beta > 0$ o vetor é tipo-tempo, $g(x, x) = 0$ o vetor é tipo nulo, e para $g(x, x) < 0$ o vetor é tipo-espaço, os vetores tipo-nulo formam um par de cones sobre a variedade, separando os vetores do tipo-tempo (interiores ao cone) dos vetores do tipo-espaço (exteriores ao cone) [36].

Derivada covariante, tensor de torção e tensor de curvatura

A operação definida em (2.38) é válido quando aplicada em uma derivada espacial num campo escalar e teremos um vetor covariantes, mas a operação já não é válida quando aplicamos em um tensor ou mesmo em um vetor, pois não teremos mais um tensor. Aqui temos a necessidade de introduzir a noção de derivada covariante para solucionar esse problema. seja A_ν um vetor covariante e A^ν um vetor contravariante, definimos a sua derivada covariante e derivada contravariante, respectivamente,

$$\nabla_\mu A_\nu \equiv A_{\nu;\mu} = \partial_\mu A_\nu - \Gamma_{\mu\nu}^\alpha A_\alpha, \quad (2.39)$$

$$\nabla_\mu A^\nu \equiv A^{\nu};_\mu = \partial_\mu A^\nu + \Gamma_{\mu\alpha}^\nu A^\alpha. \quad (2.40)$$

A derivada covariante obedece as propriedades de linearidade: $\nabla(T + S) = \nabla T + \nabla S$ e a regra de Leibniz: $\nabla(T \otimes S) = \nabla T \otimes T + T \otimes \nabla S$. A conexão afim Γ se faz necessário, é um termo de correção. A derivada covariante em (2.38) e (2.39) é um tensor se, e somente se, a conexão afim se transformar de maneira não tensorial,

$$\Gamma_{\mu'\nu'}^{\rho'} = \frac{\partial x^{\rho'}}{\partial x^\rho} \frac{\partial x^\mu}{\partial x^{\mu'}} \frac{\partial x^\nu}{\partial x^{\nu'}} \Gamma_{\mu\nu}^\rho + \frac{\partial x^{\rho'}}{\partial x^\rho} \frac{\partial^2 x^\rho}{\partial x^{\mu'} \partial x^{\nu'}}. \quad (2.41)$$

A generalização da derivada covariante para um tensor de ordem arbitrária

$$\nabla_\beta T_{\gamma_1 \dots}^{\alpha_1 \dots} = \partial_\beta T_{\gamma_1 \dots}^{\alpha_1 \dots} + \Gamma_{\beta\lambda}^{\alpha_1} T_{\gamma_1 \dots}^{\lambda \dots} + \dots - \Gamma_{\beta\gamma_1}^\tau T_{\tau \dots}^{\alpha_1 \dots} - \dots \quad (2.42)$$

Vamos definir a expressão para a conexão afim, exige-se que a derivada covariante da métrica seja nula no espaço de Riemann-Cartan, assim, como no espaço de Riemann, para satisfazer a condição de não-metricidade

$$\tilde{\nabla}_\lambda g_{\mu\nu} = 0, \quad (2.43)$$

onde $\tilde{\nabla}_\lambda$ é a derivada covariante com torção, e podemos escrever a equação (2.42) explicitamente

$$\partial_\lambda g_{\mu\nu} - \Gamma_{\lambda\mu}^\beta g_{\beta\nu} - \Gamma_{\lambda\nu}^\beta g_{\mu\beta} = 0, \quad (2.44)$$

considerando a permutação cíclica dos índices λ, μ e ν na (2.43) ficaremos com um sistema de três equações

$$\partial_\mu g_{\nu\lambda} - \Gamma_{\mu\nu}^\beta g_{\beta\lambda} - \Gamma_{\mu\lambda}^\beta g_{\alpha\beta} = 0, \quad (2.45)$$

$$\partial_\nu g_{\lambda\mu} - \Gamma_{\nu\lambda}^\beta g_{\beta\mu} - \Gamma_{\nu\mu}^\beta g_{\lambda\beta} = 0, \quad (2.46)$$

fazendo (2.44)+(2.45)-(2.43) e após fazer algumas manipulações,

$$\partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\lambda\mu} - \partial_\lambda g_{\mu\nu} = \left(\Gamma_{\mu\nu}^\beta + \Gamma_{\nu\mu}^\beta \right) g_{\beta\lambda} + \left(\Gamma_{\mu\lambda}^\beta - \Gamma_{\lambda\mu}^\beta \right) g_{\beta\nu} + \left(\Gamma_{\nu\lambda}^\beta - \Gamma_{\lambda\nu}^\beta \right) g_{\beta\mu}, \quad (2.47)$$

após multiplicarmos ambos os lados da equação por $1/2$, percebemos que o lado esquerdo da equação representa a conexão afim no espaço-tempo riemanniano, os conhecidos símbolos de Christoffel,

$$\left\{ \begin{array}{c} \beta \\ \mu\nu \end{array} \right\} = \frac{1}{2} g^{\beta\lambda} (\partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\lambda\mu} - \partial_\lambda g_{\mu\nu}), \quad (2.48)$$

o lado direito é o termo referente ao tensor de contorção:

$$K_{\mu\nu}^\beta = \frac{1}{2} \left(T_{\mu\nu}^\beta - T_{\mu\nu}^\beta - T_{\nu\mu}^\beta \right), \quad (2.49)$$

onde $T_{\mu\nu}^\beta$ é o tensor de torção:

$$T_{\mu\nu}^\beta \equiv 2\Gamma_{|\lambda\mu|}^\beta = \Gamma_{\lambda\mu}^\beta - \Gamma_{\mu\lambda}^\beta. \quad (2.50)$$

Observe que o tensor de contorção é assimétrico nos dois primeiros índices, $K_{\beta\mu\nu} = -K_{\mu\beta\nu}$ [37] e os índices são levantados e abaixados por meio da métrica, já o tensor de torção é assimétrico nos dois últimos índices. Cabe ressaltar, para um espaço-tempo plano (variedade Lorentziana), tanto a métrica quanto a eq. (2.48) só depende da escolha das coordenadas, e podemos fazer uma escolha de tal forma que os símbolos de Christoffel desapareçam. Porém a eq. (2.49) não desaparece pela escolha de coordenadas, porque depende da antin simetria da conexão. Isso nos leva a conclusão, devido a inserção do tensor contorção, fica impossível á métrica descrever toda a geometria, além da torção que tem um caráter peculiar.

Encontramos uma expressão para a conexão afim compatível com a métrica

$$\Gamma_{\mu\nu}^\beta = \left\{ \begin{array}{c} \beta \\ \mu\nu \end{array} \right\} + K_{\mu\nu}^\beta. \quad (2.51)$$

Para expressar o tensor de curvatura no espaço-tempo com torção, aplicamos o comutador das derivadas covariantes em um vetor,

$$[\nabla_\alpha, \nabla_\beta] P^\lambda = T_{\alpha\beta}^\tau \nabla_\tau P^\lambda + R_{\tau\alpha\beta}^\lambda P^\tau, \quad (2.52)$$

notamos que o comutador das derivadas covariantes no espaço-tempo com torção depende do tensor torção e do tensor de curvatura $R_{\tau\alpha\beta}^\lambda$, onde pode ser escrito

$$R_{\tau\alpha\beta}^\lambda = \partial_\alpha \Gamma_{\tau\beta}^\lambda - \partial_\beta \Gamma_{\tau\alpha}^\lambda + \Gamma_{\gamma\alpha}^\lambda \Gamma_{\tau\beta}^\gamma - \Gamma_{\gamma\beta}^\lambda \Gamma_{\tau\alpha}^\gamma, \quad (2.53)$$

o tensor de curvatura é assimétrico nos seus dois últimos índices $R_{\nu\alpha\beta}^\mu = -R_{\nu\beta\alpha}^\mu$. A curvatura (2.52) pode ser facilmente expressa através do tensor de Riemann (tensor de curvatura dependendo apenas da métrica), derivada covariante ∇_α (sem torção) e contorção como

$$R_{\tau\alpha\beta}^\lambda = R_{\tau\alpha\beta}^\lambda + \nabla_\alpha K_{\tau\beta}^\lambda - \nabla_\beta K_{\tau\alpha}^\lambda + K_{\gamma\alpha}^\lambda K_{\tau\beta}^\gamma - K_{\gamma\beta}^\lambda K_{\tau\alpha}^\gamma. \quad (2.54)$$

De forma análoga o tensor de Ricci pode ser escrito como

$$R_{\tau\beta} = R_{\tau\alpha\beta}^\alpha = R_{\tau\beta} + \nabla_\lambda K_{\tau\beta}^\lambda - \nabla_\beta K_{\tau\lambda}^\lambda + K_{\gamma\lambda}^\lambda K_{\tau\beta}^\gamma - K_{\tau\gamma}^\lambda K_{\lambda\beta}^\gamma, \quad (2.55)$$

fazendo a contração do tensor de Ricci, $g^{\tau\beta} R_{\tau\beta}$, teremos o escalar de curvatura:

$$R = R + 2\nabla^\lambda K_{\lambda\tau}^\tau - K_{\tau\lambda}^\lambda K^{\tau\gamma}_\gamma + K_{\tau\gamma\lambda} K^{\tau\lambda\gamma}. \quad (2.56)$$

Pegando o tensor de torção e dividindo-o em três componentes, como mostra [37] o traço do tensor tenção, $T_\beta = T_{\beta\alpha}^\alpha$; o vetor axial ou pseudotraço, $S^\nu = \varepsilon^{\alpha\beta\nu} T_{\alpha\beta\mu}$; e o tensor $q^{\alpha\beta\gamma}$, o qual satisfaz duas condições, o seu traço deve ser nulo ($q^\alpha \beta \alpha = 0$) e a contração dos três índices com o tensor de Levi-Civita também deve ser nula, $\varepsilon^{\alpha\beta\nu} q_{\alpha\beta\mu} = 0$. Reescrevendo-o

$$T_{\alpha\beta\mu} = \frac{1}{3} (T_\beta g_{\alpha\mu} - T_\mu g_{\alpha\beta}) - \frac{1}{6} \varepsilon_{\alpha\beta\mu\nu} S^\nu + q_{\alpha\beta\mu}. \quad (2.57)$$

2.3.2 Referenciais locais

Até aqui trabalhamos com base usuais, ou seja, com base escolhida naturalmente para o espaço tangente que definimos a partir de agora como T_P , em um ponto p , tomando as derivadas parciais em relação a cada coordenada no ponto escolhido, $\hat{e}_{(\mu)} = \partial_\mu$. Apresentaremos um novo formalismo para o espaço-tempo com torção e curvatura, o qual nos possibilita fazer uma escolha arbitrária, uma escolha em uma base qualquer, ao introduzir esse formalismo o espaço cotangente T_P^* é dado pelo gradiente das funções coordenadas, $\hat{\theta}^{(\mu)} = dx^\mu$. Considerando que em cada ponto da variedade, V , inserir um conjunto de vetores da base, supondo que eles sejam ortonormais e adequados para a assinatura da variedade. Teremos para o produto interno dos nossos vetores da base não-coordenada e levando em considerando o espaço-tempo:

$$g(\hat{e}_{(a)}, \hat{e}_{(b)}) = \eta_{ab}, \quad (2.58)$$

onde g é o tensor métrico e η_{ab} é a métrica de Minkowski no espaço tempo lorentiziano, os índices latinos a, b estão representando uma base que não se associa com um sistema de coordenadas qualquer. Assim, podemos escrever seja qual for o vetor em uma combinação linear dos vetores da base, isso vale até mesmo para a base antiga $\hat{e}_{(\mu)} = \partial_{\mu}$, por:

$$\hat{e}_{(\mu)} = e_{\mu}^a \hat{e}_a, \quad (2.59)$$

as e_{μ}^a são as conhecidas tetradas, as bases de referência locais, e a sua inversa é obtida pela relação:

$$e_a^{\mu} e_{\nu}^a = \delta_{\nu}^{\mu}, \quad (2.60a)$$

$$e_{\mu}^a e_b^{\mu} = \delta_b^a, \quad (2.60b)$$

de modo a escrever a base ortonormal não-coordenada em termos da antiga base

$$\hat{e}_{(a)} = e_a^{\mu} \hat{e}_{\mu}. \quad (2.61)$$

Definido a inversa da tetrada, a equação (2.58) pode ser reescrita e fica

$$g_{\mu\nu} e_a^{\mu} e_b^{\nu} = \eta_{ab}, \quad (2.62)$$

ou ainda, definindo em cada ponto do espaço-tempo por um referencial local

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} e_{\mu}^a e_{\nu}^b, \quad (2.63)$$

assim, a tetrada e sua inversa:

$$e_a^{\mu} = \eta_{ab} g^{\mu\nu} e_{\nu}^b. \quad (2.64)$$

Mapeando o quadro de referência curvo com o quadro de referência local, temos

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu} = \tau_{ab} e_{\mu}^a e_{\nu}^b dx^{\mu} dx^{\nu} = \eta_{ab} \theta^a \theta^b, \quad (2.65)$$

os índices gregos (μ, ν) são relacionados a coordenadas de espaço-tempo global e os índices latinos a, b são relacionados a coordenadas de local.

De forma semelhante, podemos determinar uma base ortonormal não-coordenadas no espaço cotangente T_P^* , e observando a equação acima (2.65), é de fácil constatação que as bases cotangente e tangente se relacionam entre si, através da relação:

$$\hat{\theta}^{(a)}(\hat{e}_{(b)}) = \delta_b^a. \quad (2.66)$$

A base não-coordenada 1-forma pode ser relacionada com a base antiga, por meio de:

$$\hat{\theta}^{(\mu)} = e_a^{\mu} \hat{\theta}^{(a)}, \quad (2.67a)$$

$$\hat{\theta}^{(a)} = e_{\mu}^a \hat{\theta}^{(\mu)}, \quad (2.67b)$$

Desta forma torna possível escrever os vetores e tensores, escritos na base antiga agora na base não-coordenada, isso ocorre de maneira vice-versa. Fazendo para um vetor ou tensor misto,

$$T_{\nu}^{\mu} = e_{\nu}^{\mu} e_b^{\nu} T_b^a, \quad (2.68a)$$

$$T_b^a = e_{\mu}^a e_b^{\nu} T_{\nu}^{\mu}, \quad (2.68b)$$

nessa base ortonormal não-coordenada, observando a equação (2.63) concluímos que as componentes do tensor métrico é a própria métrica de Minkowski, constatando mais uma vez que os índices gregos são associados ao espaço-tempo curvo e os índices latinos associados ao espaço-tempo plano. A ortonormalidade tem que ser respeitada (2.58), mesmo que a mudança da base não-coordenadas seja independente das coordenadas.

A transformação de Lorentz [38],

$$\hat{e}_{(a)} \rightarrow \hat{e}^{(a')} = \Lambda_{a'}^a(x) \hat{e}_a, \quad (2.69)$$

preserva a métrica plana de Lorentz, e $\Lambda_{a'}^a$ são matrizes e se transformam com dependência da posição, porém não altera a forma canônica da métrica,

$$\Lambda_{a'}^a(x) \Lambda_b^{b'}(x) \eta_{a'b'} = \eta_{ab}. \quad (2.70)$$

Observe que existe dois tipos de transformações: locais dadas pelas matrizes $\Lambda_{a'}^a$ e as de coordenadas gerais, de maneira a abranger as duas transformações temos:

$$T_{b'\nu'}^{a'\mu'} = \Lambda_{a'}^a \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^{\mu}} \Lambda_b^{b'} \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x^{\nu'}} T_{b\nu}^{a\mu}. \quad (2.71)$$

Podemos pelo uso da lei de transformação definir a derivada covariante para uma base não-coordenada, e a derivada covariante foi definida pela equação (2.42), o mesmo processo será utilizado com a ressalva que a conexão afim $\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda}$ será substituída pela conexão 1-forma, a conhecida conexão de spin $\omega_b^a = \omega_{\mu b}^a dx^{\mu}$, as quais são obtidas das equações de Maurer-Cartan: $d\hat{\theta}^a + \omega_b^a \wedge \hat{\theta}^b = 0$. As suas componentes são definidas:

$$\nabla_{\mu} \hat{\theta}^a = \omega_{\mu b}^a \hat{\theta}^b, \quad (2.72)$$

assim, a derivada covariante pode ser dada

$$\nabla_{\mu} X_b^a = \partial_{\mu} X_b^a + \omega_{\mu c}^a X_b^c - \omega_{\mu b}^c X_c^a. \quad (2.73)$$

Encontramos as componentes da conexão 1-forma em termos das tetradas e da conexão fim, ao Comparar a derivada covariante de um vetor na base das coordenadas com a derivada

do mesmo vetor da base mista convertendo para a base das coordenadas, e se torna bastante eficiente, pois no espaço-tempo sem torção a conexão afim se reduz aos símbolos de Christoffel (veja a (2.48))

$$\omega_{\mu b}^a = e_{\nu}^a e_b^{\lambda} \Gamma_{\mu\lambda}^{\nu} - e_b^{\lambda} \partial_{\mu} e_{\lambda}^a. \quad (2.74)$$

Nesse formalismo o tensor de curvatura e o tensor de torção, são conhecidos como as estruturas de Maurer-Cartan [38] e são definidos:

$$T^a = d\hat{\theta}^a + \omega_b^a \wedge \hat{\theta}^b, \quad (2.75)$$

$$R_b^a = d\omega_b^a + \omega_c^a \wedge \omega_b^c, \quad (2.76)$$

o tensor T^a é justamente o tensor de torção em 2-forma, $T^a = T_{\mu\nu}^a dx^{\mu} \wedge dx^{\nu}$, o operador d é a derivada exterior, \wedge representa o produto entre formas diferenciais, *wedge* [73].

Relacionado nessa abordagem o tensor de torção com o tensor de contorção [40], da mesma maneira na equação (2.49):

$$T^a = K_b^a \wedge \hat{\theta}^b, \quad (2.77)$$

o tensor 2-forma se relaciona a uma conexão 1-forma:

$$K_b^a = K_{\mu b}^a dx^{\mu}. \quad (2.78)$$

A conexão 1-forma relaciona com o tensor de contorção,

$$K_{\mu ab} = K_{\beta\mu\nu} \left[e_{\nu}^{\beta}(x) e_b^{\alpha}(x) - e_b^{\nu}(x) e_{\alpha}^{\beta}(x) \right] \quad (2.79)$$

2.3.3 Defeitos topológicos

Uma rede cristalina de um sólido real como já mencionado pode exibir vários defeitos, tratando de sistema físico real. E uma maneira de entender, que esses defeitos ocorrem localmente e em torno de um sítio da rede, dado por causa química, elétrica e estrutural. A capacidade de entendimento de muitas matérias se passa por compreender os defeitos em sólidos, daí suas possíveis aplicações e desenvolvimentos de novas matérias.

A teoria da Relatividade Geral (TRG) prediz que o efeito gravitacional, ocorre devido a curvatura no espaço-tempo, curvatura definida pelo tensor de Riemann [41]. As cordas cósmicas surgem devido a quebra espontânea de simetria, são um exemplo de defeito topológico na gravitação [42]; estando uma partícula em repouso em torno de uma corda cósmica estática e infinita, ela não será atraída pelo campo gravitacional, pois o espaço-tempo ao redor da corda cósmica é localmente plano, interessante que globalmente não, e uma métrica cônica será possível descrever o seu campo gravitacional.

A mesma ideia topológica explica o efeito gravitacional Aharonov-Bohm, lentes gravitacionais, e também auto-forças por uma carga em repouso. É comum em matéria condensada o surgimento de defeitos topológicos devido a quebra espontânea de simetria. O Katanaev e Volovch [33], usando uma geometria fundamental na geometria de Riemann-Cartan, a equivalência entre as teorias de defeito em sólidos e a gravitacional em 3D com torção, mostrando que cristais com defeitos topológicos em um limite contínuo, entendidos pela teoria geométrica de defeitos [35]. Assim, descreveram o meio com deslocamentos (defeitos do meio elástica) e desclinações (defeitos na estrutura de spin) no âmbito da geometria de Riemann-Cartan. Identificando o tensor de torção com a densidade superficial de deslocamentos e tensor de curvatura com a densidade superficial de desclinações. As relações entre noções físicas e geométricas que satisfaz as equações (1.33) e (2.34), estão resumidas na Tabela 1:

Sem defeitos	$R_{\lambda\mu\nu}^{\rho} = 0$	$T_{\mu\nu}^{\rho} = 0$
Deslocações	$R_{\lambda\mu\nu}^{\rho} = 0$	$T_{\mu\nu}^{\rho} \neq 0$
Desclinações	$R_{\lambda\mu\nu}^{\rho} \neq 0$	$T_{\mu\nu}^{\rho} = 0$
Deslocações e Desclinações	$R_{\lambda\mu\nu}^{\rho} \neq 0$	$T_{\mu\nu}^{\rho} \neq 0$

Tabela 2.1: Relação entre noções físicas e geométricas na teoria geométrica dos defeitos [58]

As relações acima entre noções físicas e geométricas, são situações para resolver as equações de Einstein, mas essa não é nossa preocupação aqui. Mas nas estruturas da teoria da elasticidade ordinária como na teoria geométrica dos defeitos. A seguir, vamos classificar e diferenciar os tipos de defeitos.

I. Deslocações

Os exemplos mais simples e comuns de deslocações lineares são mostrados na fig. 1.7 isso se dar pelo processo de Volterra (corta e cola). O processo abaixo, ocorre da seguinte maneira, Cortamos ao meio ao longo do semiplano $x^2 = 0$, $x^1 > 0$, movemos a parte superior ou/ inferior (não importa qual) do meio localizado sobre o corte $x^2 > 0$ e $x^1 > 0$ e deslocando com o vetor \vec{b} em direção ao eixo de deslocamento x^3 , e cole as superfícies de corte, O vetor \vec{b} é chamado de vetor Burgers. Geralmente, o vetor Burgers não é constante no corte. Ao final do processo da colagem, o meio chega ao estado de equilíbrio, denominado de deslocamento da borda, como mostra a Fig. 2a. esse tipo de deslocação é chamado de edge. Se fizermos o mesmo procedimento porém ao deslocar o \vec{b} perpendicular ao corte, será paralelo, então teremos um tipo de deslocação chamado de scroll, Fig. 2b. No processo tipo edge, podemos ainda inserir ou retirar material. E topologicamente, o meio contém um número infinito de deslocamentos e

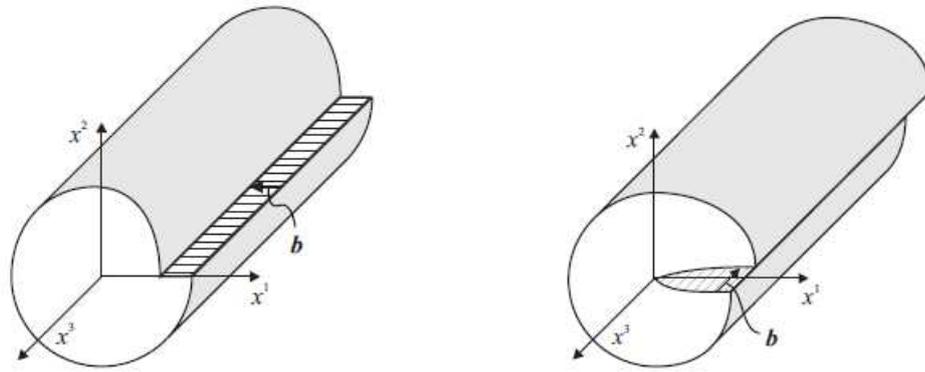


Figura 2.7: **A** (à esquerda). O vetor Burgers \vec{b} é perpendicular à linha de deslocamento (corte-cola). **B** (à direita) O vetor Burgers \vec{b} é paralelo à linha de deslocamento (corta-cola). [35, 58].

representa o espaço euclidiano \mathbb{R}^3 .

II. Desclinações

As desclinações são outro tipo de defeito em curvaturas não-nulas, pois os cristais não estão apenas sob transformações discretas, está relacionada a simetria de rotação do cristal. Tem dois tipos de desclinações, a positiva: quando é inserido material, e a negativa: quando é retirado material. Ao retirar material de um plano ω (chamado de ângulo de Frank) e forçando as superfícies livres desse plano (para grandes Ω isso requer uma energia considerável), ele irá moldar como um cone (desclinação positiva), o ângulo retirado é denominado de ângulo de déficit; mas ao invés de retirar, inserir material nesse plano, teríamos uma desclinação negativa, e o ângulo acrescentado é ângulo de acréscimo.

O cristal é localmente perfeito, exceto perto da linha de divulgação. Em um cristal cubico simples, Ω pode ser 90° , 180° , 270° , O caso 90° é exibido na fig. 1.5. Existem outros tipos de defeitos, como por exemplo interdependência de deslocamentos e divulgações (despirações): comporta os dois tipos de defeitos já mencionados; multivalência do deslocamento: Assim que um cristal contém algumas deslocamento, percebe-se que a definição de campo de deslocamento não é mais intrinsecamente única.

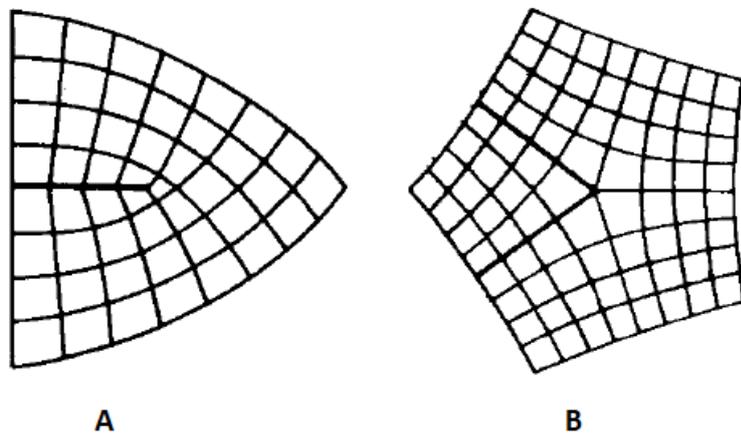


Figura 2.8: Defeito linear de Desclinação. A estrutura de treliça de uma revelação da cunha em uma estrutura cúbica simples. **A:** O ângulo de Frank 90° é igual aos ângulos de simetria 90° . **B:** O ângulo de inserido é -90° . [34]

Capítulo 3

Fase de Berry

Nesse capítulo abordamos o processo adiabático, indicando que uma partícula à circular um defeito surge naturalmente uma fase, isso ocorre especificamente por causa da geometria do sistema, e essa fase obedece a uma transformação de gauge ou de calibre; apresentamos o efeito Aharonov-Bohm, sendo exemplo da fase geométrica, mostrando que uma partícula puntiforme eletricamente carregada é afetada por um campo eletromagnético, mesmo estando confinada numa dada região onde tanto o campo magnético quanto o campo elétrico são nulos.

A fase geométrica de Berry, ou simplesmente fase de Berry, foi apresentada inicialmente por Michel V. Berry em seu trabalho "*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*" [43]. Ele demonstrou, usando a Equação de Schrödinger que, se o sistema é preparado em um autoestado não degenerado descrito por um Hamiltoniano H após uma evolução adiabática cíclica, obedecendo claro ao teorema adiabático, retornando ao seu estado original somado por um fator de fase formado por duas parcelas: uma parcela dada pela dinâmica associada a energia do sistema e uma outra parcela que vem da geometria associada ao caminho traçado no espaço de parâmetros. Nessa evolução cíclica o hamiltoniana H depende explicitamente do tempo, ou seja, $H = H(t)$, assumimos ainda que essa dependência temporal é lenta, na qual essa variação de temporal ocorre em uma escala de tempo muito maior que a escala do sistema em sua forma natural $H \neq H(t)$.

Uma interpretação geométrica da fase de Berry foi apresentada por Barry Simon no artigo "*Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry's Phase*". Uma generalizaram a construção de Berry e Simon foi feita por Frank Wilczek e A. Zee [44], aplicando a teoria a sistemas quânticos com espectro de energia degenerado, e demonstrando o surgimento de uma estrutura de calibre não-Abeliana. Segundo L.G. Yang *et al* [45], "fases geométricas foram propostas como mecanismos típicos de sistemas quânticos para preservar a memória de suas evoluções no espaço de Hilbert".

Conjuntamente Y. Aharonov e J. Anandan [46] propuseram uma forma mais geral para a fase geométrica de Berry conhecida como fase Aharonov-Anandan, em um sistema quântico removeram as condições adiabáticas seja qual for a evolução cíclica nesse sistema. Baseado no trabalho de Pancharatman [47] sobre interferência de luz polarizada Joseph Samuel e Rajendra Bhandari [48] aplicaram a fase geométrica de Berry a evoluções não cíclicas e não unitárias de sistemas quânticos. Uma extensão da teoria foi feita por J. Anandan [49], ele estendeu para os casos não-adiabáticas e não-Abelianas.

Como vemos a partir da publicação do trabalho de Berry, o conceito de fases geométricas ganhou destaque, se tornando base de estudo para vários pesquisadores. E realmente o trabalho de Berry, mostrou que um sistema ao realizar uma evolução cíclica, por causa das variações adiabáticas nos parâmetros do hamiltoniano, surge uma contribuição de uma fase, puramente devido a geométrica. Tem inúmeros exemplos tratando o fator de fase na literatura. Uma abordagem de forma didática é feita por R. Holstein [50], abordando o exemplo de uma partícula de spin-1/2 sujeita a um campo magnético externo. Holstein abrilhanta o trabalho com uma discursão a respeito dos efeitos de interferência produzidos pela diferença entre fases geométricas, e ainda sobre o argumento de P. A. M. Dirac [51] da quantização da carga elétrica em função da carga do monopólo magnético, mostra como a consequência da fase de Berry permitir compreendê-lo.

O efeito Aharonov-Bohm talvez venha a ser o mais conhecido exemplo do surgimento de um fator de fase, onde surge esse fator de fase, o qual também é abordado nesse capítulo, precursor de vários outros efeitos contendo fator de fase. Em eletromagnetismo os potenciais ϕ e \vec{A} não são diretamente mensuráveis, são apenas artifícios matemáticos, as quantidades físicas são os campos elétrico e magnético. E com a ideia advinda do eletromagnetismo os potenciais eram deixados de lado, mesmo porque em geral a menos que exista interferência, as fases não são observáveis, pois elas são proporcionais aos módulos quadrados da função de onda $|\psi|^2$ de forma que o fator de fase se cancela, lembrando que na mecânica quântica ângulos correspondem a fases. Porém A. Aharonov e D. Bohm mostraram que uma partícula carregada pode vir a ser afetada pelo potencial vetor \vec{A} , mesmo que a partícula esteja em uma região ausente de campos ou que os campos sejam nulos. O efeito Aharonov-Bohm não apenas demonstrou que podemos medir esses fatores de fase bem como os potenciais passaram a ter um papel mais significativo na mecânica quântica, por isso o hamiltoniano é expressado em termos de ϕ e \vec{A} , ao invés dos campos \vec{E} e \vec{B} .

A proposta deste capítulo é fazer uma discursão sobre os processos adiabáticos, o tratamento da fase geométrica de Berry chegando a expressão da fase de Berry, apresentando algu-

mas de suas propriedades bem como fez Michel V. Berry ao empregar o formalismo diferencial por meio da equação de Schrödinger, e por fim mostrar que o efeito Ahanonov-Bohm é um exemplo particular da fase geométrica.

3.1 Processos Adiabáticos

Em 1916, Ehrenfest [52] formulou a hipótese adiabática, segundo afirma que *"qualquer estado que se transforma adiabaticamente nos parâmetros do sistema, retorna novamente a um estado definido com os mesmos números quânticos"*. Já em 1928, Born e Fock [53] demonstraram por meio do chamado teorema adiabático a hipótese adiabática de Ehrenfest, isso para estados de sistemas quânticos não-degenerados. Contudo Born e Fock nada relataram nesta abordagem sobre os efeitos de fases geométricas, somente com quase 30 anos depois Pancharatnam [47] falou a respeito no trabalho intitulado: Teoria generalizada da interferência e suas aplicações, seguindo de Herzberg e Longuet-Higgins, Stone, Mead e Trulhar. Porém Michel V. Berry foi quem deu um tratamento formal acerca do assunto. A aproximação adiabática ganha um tratamento matemático robusto, dado por Tosio Kato [54] passando a obter mais destaque. Budich e Trauzettel [55] discutem as fases geométricas e o transporte paralelo na condição de uma evolução temporal adiabática, tratam dos denominados estados topológicos da matéria, fazem também uma revisão da demonstração do teorema adiabático dada por Born e Fock, assim como o formalismo de T. Kato.

As mudanças gradativas e suaves nas condições externas de um sistema, são conhecidos como processos adiabáticos. Para um estudo mental, imagine um pêndulo dentro de uma caixa fechada sem de atrito e/ou resistência do ar, sendo transportada por um suporte. Ao mover a caixa contendo o pêndulo de forma brusca, as oscilações do pêndulo serão desordenadas. Porém se mover a caixa de forma constante e suave, as amplitudes das oscilações não sofreram alterações. O sistema dos processos adiabáticos são caracterizados por dois tempos. Sendo T_e o tempo associado a interação de mudança dos parâmetros externos do sistema (caixa) e T_i é o tempo associado aos movimentos do próprio sistema (pêndulo). A condição de evolução adiabática é atingida quando $T_e \gg T_i$. Dado um sistema quântico governado por um Hamiltoniano $H(t)$ cuja variação é adiabática H^i para H^f .

Teorema 3.1.1 (Adiabático). *Se uma partícula que estava inicialmente no n -ésimo autoestado de H^i , após um processo adiabático ela será levada ao n -ésimo autoestado de H^f .*

A provar o Teorema 3.1.1 considera uma partícula que está no instante inicial n -ésimo au-

toestado do hamiltoniano independente do tempo, assim

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle, \quad (3.1)$$

em geral a evolução temporal da função de onda introduz uma fase:

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{-E_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \quad (3.2)$$

Vamos começar a investigar este problema introduzindo o conceito de base instantânea, onde o hamiltoniano depende do tempo. O operador Hamiltoniano revela um espectro de energia (não degenerado), como pode ser verificado por meio da equação de autovalor

$$H(t) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle, \quad (3.3)$$

Passamos agora resolver a equação dinâmica, mostrando como ocorre a evolução do autoestado da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$H(t) |\Psi_n(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_n(t)\rangle \quad (3.4)$$

Devido à dependência temporal do operador Hamiltoniano $H(t)$, para cada instante existirá um conjunto completo de autoestados $|\psi(t)\rangle$, sendo válidas as relações abaixo:

Relação de completeza

$$\sum_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)| = 1. \quad (3.5)$$

Relação de ortonormalidade

$$\langle \psi_m(t) | \psi_n(t) \rangle = \delta_{mn}, \quad (3.6)$$

é a delta de Kronecker, note que aqui, t é tratado como um parâmetro. A δ_{mn} definida como

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{se } m = n \\ 0, & \text{se } m \neq n \end{cases} \quad (3.7)$$

Dado que para

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n(0)\rangle \quad \therefore \quad |\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\Psi_n(t)\rangle.$$

Queremos encontrar os $c_n(t)$. Assim a solução geral da equação Schrödinger (3.4), em um instante qualquer, pode ser expressa por como uma combinação linear:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle, \quad (3.8)$$

onde o fator exponencial é justamente o fator de fase para o caso que a energia é dependente do tempo, dado por

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (3.9)$$

Agora substituímos a solução (3.8) na eq. de Schrödinger dependente do tempo (3.4), e ficamos com¹

$$i\hbar \sum_n \left[\dot{c}_n |\psi_n\rangle + c_n \dot{\psi}_n + i c_n \psi_n \dot{\theta}_n \right] e^{i\theta_n} = \sum_n c_n (H |\psi_n\rangle) e^{i\theta_n}, \quad (3.10)$$

observe que ao tomar a eq. (3.4) e a eq. (3.8), podemos inferir que na equação (3.10) o último termo do lado esquerdo se anula com o lado direito. Desta forma, ficamos com a seguinte expressão:

$$\sum_n \dot{c}_n e^{i\theta_n} |\psi_n\rangle = - \sum_n c_n e^{i\theta_n} |\dot{\psi}_n\rangle. \quad (3.11)$$

Recorrendo ao produto interno (3.6) por meio de Multiplicar $\langle \psi_m |$ na equação acima em ambos lados

$$\sum_n \dot{c}_n \delta_{mn} e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i\theta_n}, \quad (3.12)$$

de forma mais elegante, temos

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i(\theta_n - \theta_m)}. \quad (3.13)$$

Até o momento consideramos o caso onde $m = n$, resultado obtido na equação (3.6). Passamos a abordar o caso $m \neq n$, e nessa perspectiva podemos derivar a expressão (3.3) em relação ao tempo, resultando

$$\dot{H} |\psi_n\rangle + H |\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n |\psi_n\rangle + E_n |\dot{\psi}_n\rangle, \quad (3.14)$$

da mesma forma que fizemos no procedimento passado, recorrendo ao produto interno (3.6) por meio de Multiplicar $\langle \psi_m |$ na equação acima em ambos os lados

$$\langle \psi_m | \dot{H} |\psi_n\rangle + \langle \psi_m | H |\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n \delta_{mn} + E_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle, \quad (3.15)$$

pela hermiticidade do hamiltoniano [50], podemos aplicar a propriedade $\langle \psi_m | H = \langle \psi_m | E_m$, e lembrando que essa abordagem é para o caso $m \neq n$,

$$\langle \psi_m | \dot{H} |\psi_n\rangle = (E_n - E_m) \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle. \quad (3.16)$$

Portanto, levando a expressão acima na equação (3.13) nos permite reescrevê-la como

$$\dot{c}_m(t) = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle - \sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle \psi_m | \dot{H} |\psi_n\rangle}{E_n - E_m} e^{(-i/\hbar) \int_0^t [E_n(t') - E_m(t')] dt'}. \quad (3.17)$$

¹Utilizou-se um ponto pra caracterizar a derivada do tempo

A variação é muito lenta, admitindo que na aproximação adiabática o tempo relacionado ao movimento externo do sistema é muito maior do que o tempo relacionado de oscilações de uma partícula confinada, implicando em

$$\sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \rightarrow 0,$$

o que permite-nos resolver de forma trivial a equação para \dot{c}_m , que reescrevemos

$$\dot{c}_m(t) = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle, \quad (3.18)$$

e sua solução

$$c_m(t) = -c_m(0) e^{i\gamma_m(t)}, \quad (3.19)$$

o fator de fase é dado como,

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \psi_m(t') | \frac{\partial}{\partial t'} \psi_m(t') \rangle dt', \quad (3.20)$$

voltando a equação (3.8) e substituindo o resultado obtido acima

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_m(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.21)$$

Um caso específico onde $c_n(0) = 1$, e a partícula encontra-se no n -ésimo autoestado, após um processo adiabático esta partícula continuará nesse mesmo n -ésimo autoestado, porém com um acréscimo de uma fase (fase dinâmica, evolução dos estados com o tempo), ou seja, esses autoestados adquirem apenas fases que os definem como estados adiabáticos,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_m(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.22)$$

É curioso vê que para sistemas unidimensionais a fase $\gamma_m(t)$ é nula. Contudo, para sistemas em $D > 1$ esta fase pode ser não nula e seus efeitos serem muito interessantes. Essa é a chamada fase de Berry, que passaremos a estudar adiante.

3.2 Fases geométricas

O vetor de estado $\Psi_n(t)$, na eq. (3.22), foi um dos resultados obtidos por Berry [43]. Isso ocorre da situação de que quando um sistema quântico é preparado inicialmente no n -ésimo autoestado do Hamiltoniano H , ou seja, $|\psi_n\rangle$, após evoluir adiabaticamente, o sistema será encontrado no n -ésimo autoestado do Hamiltoniano $H(t) |\psi_n(t)\rangle$, acrescentado por um fator de fase adicional, um fato de sua evolução no espaço de parâmetros. Vamos assumir que a dependência temporal explícita de H seja devida à dependência dessa mesma hamiltoniana com

respeito a um conjunto de parâmetros $R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(T)$ que denotaremos $\vec{R}(t)$. Vamos demonstrar que ao percorrer um caminho C nesse espaço de parâmetros, tal como $R(0) = R(t)$, permite fazermos

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_n\rangle = \frac{\partial R^i}{\partial t} \frac{\partial}{\partial R^i} |\psi_n\rangle, \quad (3.23)$$

desta maneira podemos reescrever o fator de fase (3.20)

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R^i} \rangle \frac{dR^i}{dt'} dt'; \quad (3.24)$$

$$= i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R | \psi_n \rangle \cdot d\vec{R}; \quad (3.25)$$

$$= \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \vec{\mathcal{A}}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{R}. \quad (3.26)$$

Onde $\vec{\mathcal{A}}_n$ é o potencial vetor de Mead-Berry [56], expressado

$$\vec{\mathcal{A}}_n = i \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R | \psi_n \rangle. \quad (3.27)$$

No caso de uma evolução cíclica em uma curva fechada $C \rightarrow C$, ou seja, o hamiltoniano volta ao estado inicial após um tempo T . Assim, o fator γ_n (3.20) pode ser escrita como uma integral de linha ao longo de uma curva suave C no espaço \mathcal{M} , com C representando o caminho percorrido, desde o instante $t_0 = 0$ até o instante T qualquer,

$$\gamma_n(T) = i \oint_C \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R | \psi_n \rangle \cdot d\vec{R} \quad (3.28)$$

A fase de Berry² não depende do caminho percorrido. A natureza do integrando da fase de Berry pode ser investigada, uma vez considerada a condição de normalização dos autoestados instantâneos. Verifica-se desse modo que o integrando da equação (2.25) é um número imaginário puro, e assim, conclui-se que γ_n é uma função real. Assumindo que os autoestados são normalizados,

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1. \quad (3.29)$$

Admitimos que os autoestados são normalizados,

$$\nabla_R \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 0, \quad (3.30)$$

podemos ainda escrever,

$$\langle \nabla_R \psi_n | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle^* + \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = 0, \quad (3.31)$$

Na expressão acima qualquer número somado ao conjugado é zero, então para que a igualdade seja satisfeita $\langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle$ tem que ser um imaginário puro, garantindo que a fase de Berry $\gamma_n(T)$ eq. (3.26) sempre é real, porque $\vec{\mathcal{A}}_n$ sempre é real.

²Se manifestando tanto em sistemas fermiônicos quanto bosônicos

Para verificar como as fases de Berry $\gamma_n(t)$ se modificam mediante passar por um processo adiabático, vamos fazer uma transformação de *gauge*,

$$|\psi'_n\rangle = e^{i\xi_n(R)} |\psi_n\rangle, \quad (3.32)$$

onde $e^{i\xi_n}$ é um fator de fase. Isso ocorre porque os autovetores $|\psi_n\rangle$ são determinados por (3.1) até um fator de fase. caso $\xi_n(R)$ seja uma função bem definida do parâmetro adiabático R , teremos a partir da definição do potencial vetor de Mead-Berry, equação (2.25),

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n &\rightarrow \mathcal{A}'_n = i \langle \psi'_n | \nabla_R | \psi'_n \rangle; \\ &= i \langle \psi_n | e^{-i\xi_n(R)} \nabla_R e^{i\xi_n(R)} | \psi_n \rangle; \\ &= i \langle \psi_n | \nabla_R | \psi_n \rangle + i e^{-i\xi_n(R)} (\nabla_R e^{i\xi_n(R)}); \\ &= \mathcal{A}_n(R) - \nabla_R \xi_n(R). \end{aligned} \quad (3.33)$$

A fase de Berry em decorrência disso:

$$\begin{aligned} \gamma_n(t) &\rightarrow \gamma'_n(t) = \int_{R(0)}^{R(t)} \mathcal{A}'_n(R) \cdot dR \\ &= \gamma_n(t) - \xi(R(t)) + \xi_n(R(0)). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Já se $\xi_n(R)$ for arbitrário, podemos escolhê-la de modo que a fase de Berry desaparece e recuperamos o caso específico (3.8),

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.35)$$

Toda via $\xi_n(R)$, no presente contexto, for $0 \leq \xi_n(R) \leq 2\pi$ o que significa ser um caminho fechado e após um determinado tempo T ao retornarem à posição inicial o autoestado apresentará o mesmo valor que tinha inicialmente, não sendo possível fazer uma escolha arbitrária de $\xi_n(R)$ e conseqüentemente o não desaparecimento da fase de Berry. Dessa maneira, podemos fazer a seguinte ponderação:

$$\begin{aligned} |\psi'_n\rangle &= e^{i\xi_n(R(T))} |\psi_n\rangle, \\ &= e^{i\xi_n(R(0))} |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Isso implica que para $R(T)=R(0)$, e demonstra então que há uma restrição sobre

$$e^{i\xi_n(R(T))} = e^{i\xi_n(R(0))} \quad (3.37a)$$

$$|\psi_n(0)\rangle = |\psi_n(T)\rangle, \quad (3.37b)$$

o que resulta no valor da função $\xi_n(R)$

$$\xi_n(R(T)) - \xi_n(R(0)) = 2\pi\iota \quad (3.38a)$$

$$\xi_n(R(T)) = \xi_n(R(0)) + 2\pi\iota, \quad (3.38b)$$

com ι inteiro. Dessa forma a Eq. (3.26), com evolução cíclica, fica

$$\begin{aligned}\gamma_n(T) \rightarrow \gamma'_n(T) &= \oint_c \mathcal{A}'_n(R) \cdot dR \\ &= \oint_c \mathcal{A}_n(R) \cdot dR - 2\pi\iota \\ &= \gamma_n(T) - 2\pi\iota.\end{aligned}\tag{3.39}$$

Observe que não é possível desaparecer com a fase de Berry pois é invariante sob uma transformação de *gauge* e não podendo então ser removida de (3.22), e mostra também que γ_n modifica-se apenas por um múltiplo inteiro de 2π quando feita a transformação de *gauge* eq. (3.33). No caso do parâmetro \vec{R} for tridimensional, R_1, R_2, R_3 , teremos o cenário análogo ao do eletromagnetismo.

3.3 A fase quântica de Berry - Efeito Aharonov-Bohm

Em 1959 Yakir Aharonov e David Bohm publicou um artigo [46] em que eles imaginaram a seguinte experimento mental: Um feixe de elétrons é dividido em dois e passam em lados opostos em volta de um solenoide muito longo no qual passa uma corrente elétrica I , de tal forma que o campo \vec{B} fora do solenoide é zero (veja a figura 2.1). No final os feixes são recombinados, e os elétrons que seguiram caminhos diferentes, interferiram entre si. Eles adquiriram fases diferentes havendo um efeito detectável.

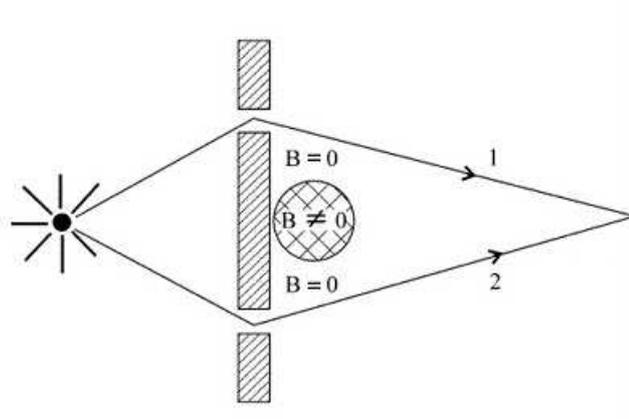


Figura 3.1: Esquema experimental sugerido por Aharonov e Bohm para gerar o padrão de interferência, e confirmada experimentalmente por Tonomura et al. [57].

Porém, mesmo com o campo magnético sendo zero fora do solenoide, seu potencial vetor

não é. Isso pode ser provado facilmente através da transformação de *gauge*,

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad ; \quad A \rightarrow A' = A + \nabla \Lambda. \quad (3.40)$$

Os novos pares de potenciais acima produzem os mesmos campos, sendo Λ uma função arbitrária, e $\nabla \cdot A = 0$,

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}, \quad (r > a) \quad (3.41)$$

onde $\Phi = \pi a^2 B$ é o fluxo magnético, e a é o raio do solenide. Mostrando que os potenciais desempenham um papel importante e por isso o hamiltoniano é expressado em termos deles ao invés dos campos \vec{E} e \vec{B} . Na referência [43] M. V. Berry demonstra que o efeito Aharonov-Bohm pode ser interpretado como um exemplo de fase geométrica. Vamos agora considerar o cálculo da fase de Berry associada a dinâmica do monopólo magnético na presença do solenoide.

Para isso, vamos partir da consideração que a partícula de carga q está confinada em uma caixa por um potencial infinito dado por ($V = \vec{r} - \vec{R}$). Sendo \vec{R} o vetor que localiza a extremidade central dentro da caixa e o vetor \vec{r} representa a posição da partícula no interior da caixa em relação a origem do sistema, estabelecendo dessa forma um ponto de referência, O , no centro da caixa, assegurando a recuperação da fase, inicialmente convencionada, ao fim de um trajeto em torno da linha de fluxo (ver figura 2.2). A caixa cúbica é então transportada em torno da linha de fluxo sobre a curva C no caminho fechado, e neste caso em particular o processo não precisa ser necessariamente adiabático.

Nesse caso a equação de Schrödinger independente do tempo será:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 + V(\vec{r} - \vec{R}) \right] |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle. \quad (3.42)$$

Como já vimos na seção 2.1 as soluções da Eq. (3.40) são encontradas ao usarmos o fator de fase de Dirac

$$\langle \vec{r} | \psi_n \vec{R} \rangle = e^{i\Omega} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}). \quad (3.43)$$

em que, por definição

$$\Omega = \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (3.44)$$

com ψ_n , uma função do deslocamento ($\vec{r} - \vec{R}$), satisfazendo a mesma equação de autovalor, porém com $\vec{A} \rightarrow 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r} - \vec{R}) \right) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (3.45)$$

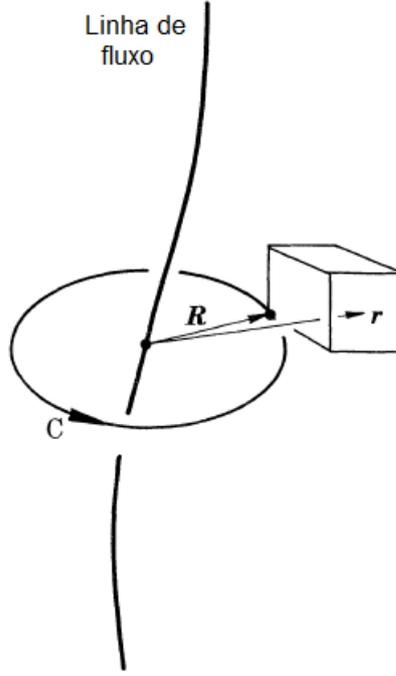


Figura 3.2: Efeito Aharonov-Bohm em uma caixa transportada em volta de uma linha de fluxo [43].

Para calcular a fase de Berry devemos determinar primeiro a quantidade $\langle \psi_n | \nabla_{\vec{R}} \psi_n \rangle$, verificando que

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{R}} |\psi_n \vec{R}\rangle &= \nabla_{\vec{R}} \left[e^{i\Omega} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right] \\ &= \left(-i \frac{q}{\hbar} \vec{A}_r \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) + \nabla_{\vec{R}} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right) e^{i\Omega}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

logo,

$$\begin{aligned} \langle \psi_n(\vec{R}) | (\nabla_{\vec{R}} |\psi_n \vec{R}\rangle) &= \int e^{-i\Omega} \left[\psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right]^* e^{i\Omega} \left[-i \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) + \left(\nabla_{\vec{R}} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right) \right] d^3 \vec{r} \\ &= -i \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) - \int \left\{ \left[\psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right]^* \left(\nabla_{\vec{r}} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right) \right\} d^3 \vec{r}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

O gradiente $\nabla_{\vec{r}}$, quando age sobre uma função de $(\vec{r} - \vec{R})$, exibe a propriedade $\nabla_{\vec{R}} = -\nabla_{\vec{r}}$. A integral da Eq. (3.44) é basicamente i/\hbar vezes o valor esperado do momento em um autoestado do Hamiltoniano $(-\hbar^2/2m)\nabla^2 + \nabla$ de acordo com a a Ref. [24], é igualmente nulo. Assim sendo,

$$\langle \psi_n | \nabla_{\vec{R}} \psi_n \rangle = i \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}). \quad (3.48)$$

Voltando esse resultado na forma da fase de Berry equação, temos

$$\begin{aligned}
 \gamma_n(T) &= i \oint \langle \psi_n(\vec{R}) | (\nabla_{\vec{R}} | \psi_n(\vec{R}) \rangle) \cdot d\vec{R} \\
 &= \frac{q}{\hbar} \oint \vec{A}_r(\vec{R}) \cdot d\vec{R} \\
 &= \frac{q}{\hbar} \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{a} \\
 &= \frac{q\Phi}{\hbar}, \tag{3.49}
 \end{aligned}$$

provando que o efeito Aharonov-Bohm é um caso particular da fase geométrica. Note que o resultado é invariante de gauge, de fato uma transformação de *gauge* deixa $\gamma_n(T)$ invariante.

Capítulo 4

Grafeno na presença de desclinações sobre a ação de um campo magnético externo

4.1 Motivação

O Grafite e materiais de estruturas semelhantes demonstra ter incrível versatilidade na formação de uma gama de variedade de morfologias, texturas e estruturas excepcionais, do macroscópico ao microscópico [59], claro isso ocorre devido a estrutura cristalina intrínseca do grafite. As Nanoestruturas curvas de cristais de carbono, como os nanotubos, nanocones e fullerenos são materiais extremamente importantes, sem contar das suas extraordinárias propriedades estruturais, mecânicas e eletrônicas [9]. Essas formas se tornaram a fronteira de estudos dos nanomateriais, devido as suas aplicabilidades tecnológicas. Suas várias formas de morfologias e microestruturas efeitos de distorção das folhas de grafeno durante o seu crescimento e pela inserção de vários defeitos, como por exemplo os já mencionados no capítulo 1: deslocamentos e desclinações.

Os nanocones foram observados logo após a descoberta dos nanotubos em 1991, como tampas nas extremidades dos nanotubos [60](Fig. 3.1), e também como estruturas livres. E essas estruturas topológicas cônicas tenha ficado de lado por um tempo, agora volta a cena. O fato dos nanocones tem sido usada para investigar a nucleação e o crescimento de estruturas curvas de carbono [61], pois subtende-se que a presença de pentágonos tenha um papel fundamental na construção atômica. Quando uma inserção ou uma extração em uma folha de grafeno, um defeito topológico de ± 60 é formado (Fig. 3.2a), formando uma estrutura de cone (Fig. 3.2b).

A analogia que fazemos é que vértice do nanocone é o encontrado na ponta do nanotubo.

Esses cúmes de nanotubos atraíram bastante atenção, imaginavam a existências desses estados [62]. Tais picos foram observado experimentalmente em nanotubos de parede múltipla e, posteriormente de parede simples, no último caso se utilizou o método da deposição química a vapor para sintetizar nanocones de carbono dentro de nanotubos. Nanocones de carbono com ângulos de cone (θ) de $\pm 19^\circ$, $\pm 39^\circ$, $\pm 60^\circ$ (ver Fig. 1c), $\pm 85^\circ$ e $\pm 113^\circ$ foram observados em uma amostra de carbono gerada pela pirólise de hidrocarbonetos [61].

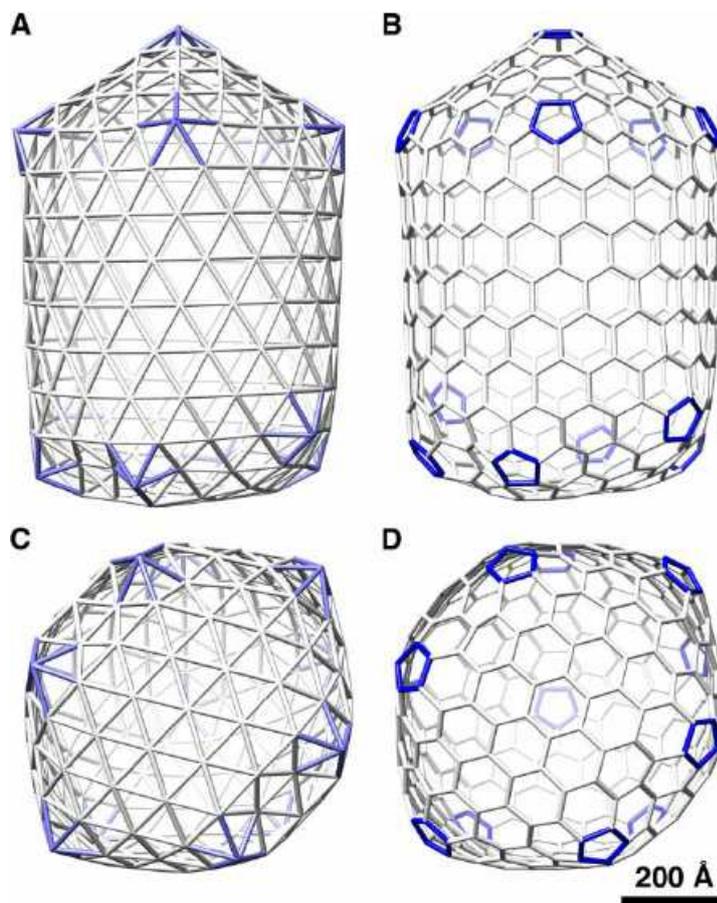


Figura 4.1: Formas ilustrativas com possibilidades de encontrarmos os nanocones ligados à outras estruturas [63].

Em 1992, Katanaev e Volovich revelaram a existência da equivalência da gravidade em 3D e a teoria de defeitos em sólidos [33]. Tornando possível o estudo de efeitos clássicos e quânticos na presença de defeitos, como efeito Aharonov-Bohm, os níveis de Landau, efeito Casimir, cálculos de geodésicas, e além de estudar a dinâmica de elétrons e buracos na presença de desclinação [64]. O processo teórico para a geração dos cones e/ou nanocones, são obtidos por meio do processo de Volterra [65], no qual um material tem um corte em uma região aleatória, retirando uma parte desse material, α menor que 1, mas especificamente de uma folha plana e os dois lados cortados são unidos. Podemos ter também a desclinação negativa, obtida com

a inserção de um material com ângulo de 60° , possui valor de α maior que 1, é um exemplo estudado por Azevedo et al [66].

Os defeitos topológicos por desclinações podem ser observados na rede cristalina hexagonal do grafeno, classificados devido a simetria de rotação da rede cristalina e o processo de voltera [65], popularmente conhecido pelo processo de "corta e cola", é o responsável por descreve-las. Basicamente a estrutura é cortada em linha reta sendo feita a remoção ou adição (representada pela cor amarela) de um setor angular, $\lambda = \pi/3$. Veja a figura à seguir já mencionado na seção anterior, temos uma desclinação positiva com a remoção de setor angular (fig. 3.2(b)) e desclinação negativa com a inserção (fig. 3.2(c)).

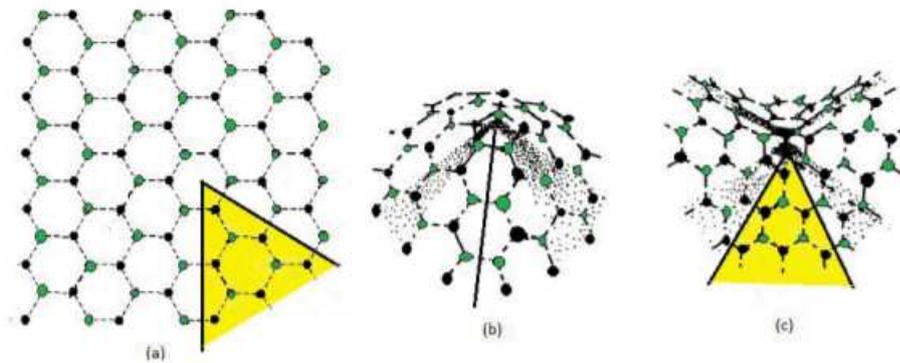


Figura 4.2: Ilustração do Processo Volterra. (a) Folha de grafeno, com o setor angular, (b) declinação positiva, e (c) declinação negativa [67].

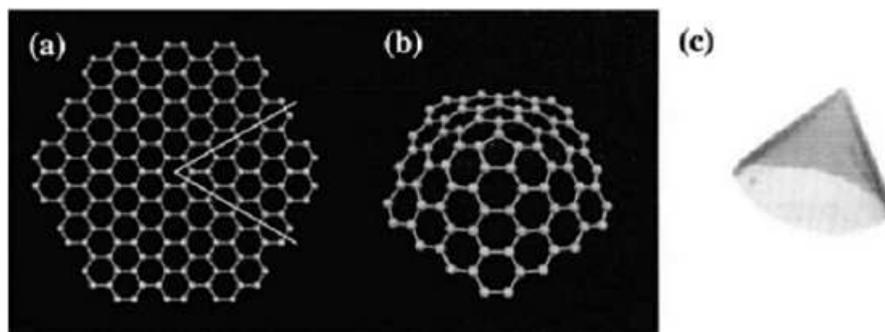


Figura 4.3: a) Remoção de uma secção de 60° de uma folha de grafeno, formando uma estrutura de cone, (b) Pela inserção de ângulo, ao juntar as bordas a estrutura conica surge. c) Imagem microscopia electrónica do nanocone que contém três pentágonos no ápice da ponta [61].

Devido serem bons emissores de elétrons por tunelamento, os nanocones despertam um grande e particularmente interesse na fabricação de dispositivos eletrônicos. A indústria eletrônica vê a possibilidade da utilização dos nanocones como pequenas pontas emissoras de

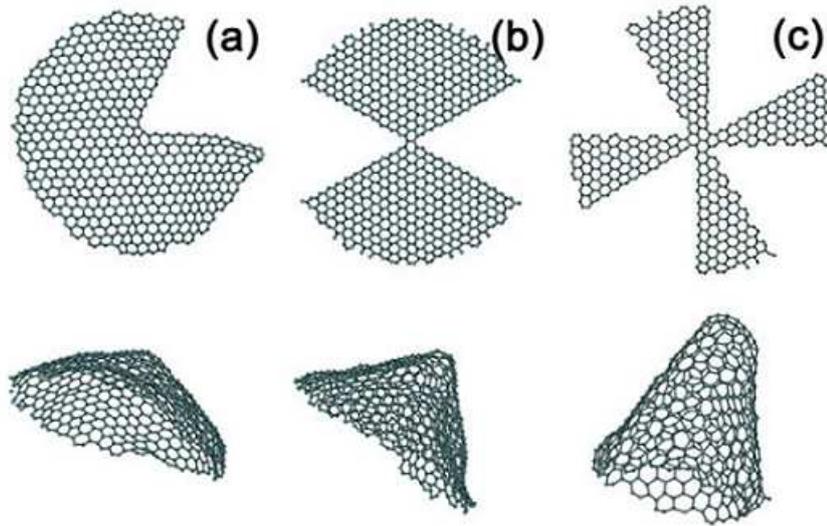


Figura 4.4: Formas teóricas de se gerar os nanocones e seus respectivos ângulos de desclinações [63].

elétrons [41], na ordem de nanométrica na escala compreendida entre 1 a 100 nm. As características geraram novas propriedades, as quais nessa escala são impossíveis de serem observadas no mundo macroscópico, já que a mecânica quântica é quem rege os efeitos na escala nanométrica. As nanoestruturas são classificadas em três formas e está relacionada com o confinamento dos elétrons (o movimento dos elétrons): uma dimensão (nano-fitas), duas dimensões (nanofios) e em três dimensões temos os pontos quânticos, conhecidos como transistores de apenas um elétron ou bit quântico. Nanocones de carbono de ângulo pequeno podem ser usados potencialmente para sondas e elementos de emissão de campo e gerando interessantes aplicações potenciais em uma nanotecnologia [68]. O interesse na redução contínua do tamanho dos dispositivos eletrônicos é visando justamente o desempenho e a diminuir os custos.

4.2 Abordagem geométrica cônica e a equação de Dirac sem massa no espaço-tempo curvo

Usando da teoria geométrica dos defeitos em sólidos [33] para descrever as desclinações em grafenos e nanocones. Os defeitos comporta-se como a fonte de um campo de distorção geométrico. Segundo à teoria, as modificações introduzidas no contínuo elástico pelo defeito são descritas por uma métrica. Esta métrica é uma solução da equação tridimensional de Einstein-Cartan abrangendo toda a informação topológica sobre o meio. Devido as propriedades topológicas e geométricas o efeito geométrico de Aharonov-Bohm manifesta-se de forma natural.

As folhas cônicas do grafeno serão descritas nesta aproximação do contínuo pela métrica bidimensional no espaço-tempo

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\phi^2 \quad (4.1)$$

sendo α o parâmetro identificador do defeito e está diretamente relacionado com o setor angular, λ , dado pela expressão ¹ $\alpha = 1 \pm \lambda/2\pi$. A simetria hexagonal do grafeno nos possibilita concatenar $\lambda = \pm N\pi/3$, onde N é o número inteiro (0 à 6) indicando com o número de setor angular removido ou inserido, assim a expressão para α , torna-se ² se torna:

$$\alpha = 1 - \frac{N}{6}. \quad (4.2)$$

A geometria possui uma singularidade cônica, dada pelo tensor de curvatura:

$$R_{\rho,\phi}^{\rho,\phi} = \frac{1-\alpha}{4\alpha} \delta_2(\vec{\rho}), \quad (4.3)$$

onde $\delta_2(\vec{\rho})$ é a função delta em duas dimensões, o tensor nos diz que a origem da curvatura é no centro do defeito, em outras partes a curvatura é nula. Os Valores de α no intervalo $0 < \alpha < 1$, significam que removemos um setor da folha ou mais setores para formar um defeito e também apresenta uma curvatura positiva, já no intervalo $\alpha > 1$, significa que inserimos um setor na folha ou mais setores para formar o defeito e apresenta uma curvatura negativa.

Introduzindo curvatura na folha de grafeno, através de inserir ou remover setor angular, uma distorção geométrica surge na rede hexagonal do grafeno, e tal distorção pode ser medida pelo giro de um vetor tangencial ao redor do ápice da estrutura cônica, isso ocorre em torno do defeito em um caminho fechado. O estudo das propriedades globais da geometria de um nanocone de grafite, contatou que através do transporte paralelo de um spinor ao longo de um caminho fechado, obtém uma fase não-trivial, essa mudança de fase denominada de holonomia [69]. A analogia do fator de fase adquirido é do efeito Aharonov-bohm, a função de onda do elétron passa a apresentar um fator de fase ϕ_{AB} , isso ocorre ao percorre uma trajetória em torno de um fluxo gerado por um solenoide muito longo, dado por:

$$\phi_{AB} = \oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = q\Phi_c, \quad (4.4)$$

onde $\vec{A}_{(\vec{r})}$ é o potencial vetor, q a carga do elétron e o Φ_c o fluxo de campo magnético do solenoide. Observando o efeito Aharonov-Bohm, passamos a considerar que o efeito de curvatura no grafeno dar origem a um campo de gauge efetivo, isso devido a descontinuidade apresentada no grafeno com defeito, onde temos

$$U(c) = e^{i \oint \vec{A} \cdot d\vec{r}}, \quad (4.5)$$

¹Quando $\alpha = 1$, significa ausência de desclinação

²O sinal negativo representa a remoção de setor angular

onde $U(c)$ é a de holonomia encontrada a partir da expressão

$$U(c) = P e^{-\oint \Gamma_\mu(x) dx^\mu}, \quad (4.6)$$

onde P representa o produto ordenado, e Γ_μ é a conexão spinorial, já familiarizado na teoria de campos em espaços curvos. A análise feita por [70] chegaram na expressão abaixo para holonomia dos cones de grafeno

$$U(c) = \exp \left[\frac{-i}{2} (\alpha - 1) \sigma^3 \phi \right]_0^{2\pi} \quad (4.7)$$

A matriz de holonomia, $U(C)$, que significa transporte paralelo de um spinor ao longo de um caminho c ao redor do cone, possibilita a partir da métrica dada (4.1) descrever a geometria cônica do grafeno no limite contínuo, σ^3 é uma matriz de Pauli.

Indo adiante, usando a seguinte propriedade $e^{i\theta} = \cos\theta - i\text{sen}\theta$, a famosa formula de Euler, e considerando que σ^3 é constante, teremos

$$U(c) = \exp \left\{ -i\sigma^3 \left[\frac{1}{2} (\alpha - 1) \phi \right] \right\}_0^{2\pi}, \quad (4.8)$$

definindo $\theta = 1/2(\alpha - 1)\phi$, e substituindo os limites

$$U(c) = \cos[(\alpha - 1)\pi] + i\sigma^3 \text{sen}[(\alpha - 1)\pi] \quad (4.9)$$

Escrevendo em termos de N , equação (4.2),

$$U(c) = \cos \left[\frac{N\pi}{6} \right] + i\sigma^3 \text{sen} \left[\frac{N\pi}{6} \right]. \quad (4.10)$$

A expressão (4.10) nos fornece a fase quântica adquirida pela função de onda quando transportada em circulo ao redor do cone/nanocone. Ao transportar a função de onda Ψ , circulando o defeito, obtém-se

$$\Psi' = U(c)\Psi, \quad (4.11)$$

no qual $U(c)$ concede a fase obtida pela função de onda nesse processo; a interpretação dada a esse efeito é análogo ao efeito Aharonov-Bohm,[70], só que no nosso caso o fluxo magnético é substituído por um "fluxo de curvatura". O que ocorre aqui é que em uma rede hexagonal plana, os spinores ao circularem através de um caminho fechado em torno do defeito, vemos que os mesmos pulam da sub-rede A para a sub-rede B, vice-versa, porém ao inserir uma desclinação acontece que átomos da mesma sub-rede acabam por se conectarem, fazendo com que os spinores saltem entre sítios da mesma sub-rede (veja a fig. 3.6).

Essa descontinuidade pedi um acréscimo de um termo similar a um campo de gauge não-Abeliano, como é feito em [67], o qual compensa o salto do spinor para a mesma sub-rede. O termo para a retirada de um setor

$$\oint_{(c)} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{\pi}{2} \tau^2 \quad (4.12)$$

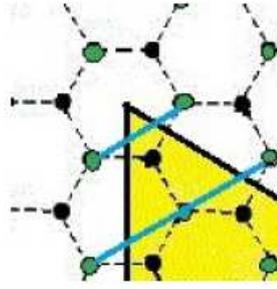


Figura 4.5: Descontinuidade nas sub-redes do grafeno [67].

sendo τ^2 uma das matrizes de Pauli, a qual mistura as componentes spinoriais referentes aos pontos de Fermi, K_+ e K_- .

Foi observado por Crespi e Lammert [68], o potencial vetor \vec{A} circular ao redor de um caminho fechado no ápice da estrutura cônica, a seguinte holonomia para a função de onda dos spinores referente aos números de setores removidos ou inseridos:

$$U'(c) = \exp[-i3\pi(\alpha - 1)\tau^2] \quad (4.13)$$

A partir da expressão abaixo encontramos o termo de gauge não-Abeliano, Ω/ρ , a ser acrescentado no modelo,

$$\oint_{(c)} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \oint_{(c)} \frac{\Omega}{\rho} \cdot dl. \quad (4.14)$$

A partir da expressão de holonomia de Crespi e Lammert (4.13) e a equação (4.14), conseguimos o termo que compensa descontinuidade fictícia da função de onda, onde o sinal \pm corresponde aos pontos de Fermi, K_+ e K_- ,

$$\Omega = \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1). \quad (4.15)$$

Para a existência do grafeno com defeito o valor máximo do número de setores removidos ou inseridos de $N = 5$, lembrando que no grafeno com defeitos topológicos do tipo com desclinação, a descontinuidade fictícia da função de onda para os spinores, só subsiste quando o número de setores removidos ou inseridos $N = 1, 3$ ou 5 , no caso de $N = 2$ ou 4 não existe a descontinuidade.

Por fim, a presença de desclinações (com a inclusão da conexão spinorial), a curvatura, e também a inclusão de um campo de gauge não-Abeliano (compensar a descontinuidade fictícia da função de onda dos spinores), os efeitos da curvatura nas folhas de grafeno serão investigados pela Equação de Dirac em espaço-tempo curvo. Rescrevemos a equação (2.26):

$$\gamma^\mu \left(i\nabla_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (4.16)$$

Definimos a derivada covariante ∇_μ como $\partial_\mu + \Gamma_\mu$, onde δ_μ é a derivada ordinária (derivada normal) em relação as coordenadas do espaço-tempo curvo, Γ_μ é a conexão spinorial obtida por Furtado, Moraes e Carvalho em [62], Ω_μ/ρ definido antes.

Para a métrica dada (4.1) construiu-se todo o modelo utilizando a equação de Dirac sem massa em espaço-tempo curvo com 2 + 1 dimensões, na abordagem geométrica de defeitos, causado pela desclinação, acrescentado um campo de gauge não-Abeliano. Foi adotado a assinatura (+, -, -) para a métrica e por conveniência $h = c = 1$.

Na equação (4.16), γ^μ são as matrizes de Dirac no espaço curvo, e satisfazem a relação de comutação $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$. No caso do tensor métrico que é definido por (4.1) pode ser escrito em termos dos campos de tetradas locais $g^{\mu\nu} = e_a^\mu e_b^\nu \eta^{ab}$, sendo os índices latinos a,b,c,..., associados ao espaço-tempo de Minkowski e equivalem a 0,1,2,..., já os índices gregos μ, ν, \dots associados ao espaço-tempo curvo e equivalem a t, ρ, ϕ, \dots .

Definimos as matrizes de Dirac da seguinte forma

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Os spinores de Dirac escrevemos em duas componentes, apresentamos desta maneira a representação em forma das matrizes de Pauli,

$$\beta\gamma^1 = \sigma^1, \beta\gamma^2 = \sigma^2, \beta = \sigma^3, \quad (4.18)$$

e temos que $\beta\gamma^0 = (\sigma^3)^2 = I$.

Substituindo a derivada covariante $\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu$, na equação (4.16), e reescrevendo

$$\gamma \left(i\partial_\mu + i\Gamma_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (4.19)$$

Apresentamos agora a base de forma dupla apropriada que descreve o fundo de um nanocone gráfico, são referenciais locais dos observadores e são definido por $\hat{\theta}^a = e_\mu^a dx^\mu$, para cada elemento de linha da métrica (4.1):

$$\hat{\theta}^0 = dt, \quad (4.20a)$$

$$\hat{\theta}^1 = \cos(\phi)d\rho - \alpha\rho\sin(\phi)d\phi, \quad (4.20b)$$

$$\hat{\theta}^2 = \sin(\phi)d\rho + \alpha\rho\cos(\phi)d\phi, \quad (4.20c)$$

assim, reescrevemos os campos de tetradas $e_\mu^a(x)$, como sua inversa $e_a^\mu(x)$, na forma matricial:

$$e_\mu^a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\alpha\rho\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \alpha\rho\cos\phi \end{pmatrix}, e_a^\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\frac{\sin\phi}{\alpha\rho} & \frac{\cos\phi}{\alpha\rho} \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

onde $e_\mu^a e_b^\mu = \delta_b^a$, tanto a tetrada quanto a sua inversa satisfazem as relações ortogonais e mapeiam o referencial curvo com o referencial local. As formas de conexão de spin são obtidas da primeira das equações da estrutura de Maurer-Cartan: $d\hat{\theta}^a + \omega_b^a \wedge \hat{\theta}^b = 0$, onde utilizamos a propriedade da derivada exterior que diz: $d(dt) = d(1 \cdot dt) = d1 \wedge dt = 0 \wedge dt = 0$ [73]. Mas primeiro precisamos calcular a conexão um-forma, $\omega_b^a = \omega_{\mu b}^a dx^\mu$, isso para podermos obter a conexão spinorial, vendo a simetria do defeito através da métrica (4.1) existe duas componentes não-nulas para a conexão 1-forma [75]

$$\omega_1^2 = -\omega_2^1 = (\alpha - 1)d\phi. \quad (4.22)$$

As conexões de spin e as conexões de 1-forma são relacionadas por: $\Gamma_{\mu b}^a(x) = \omega_{\mu b}^a dx^\mu$, Daqui em diante, obtemos a seguinte conexão de matriz

$$\Gamma_{\mu b}^a(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(\alpha - 1) \\ 0 & (\alpha - 1) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Enfim, a conexão spinorial sendo descrita em termos da conexão de spin, dada por:

$$\Gamma_\mu = -\frac{1}{8}\Gamma_{\mu ab}[\gamma^a, \gamma^b], \quad (4.24)$$

somente uma componente não-nula, e portanto, as conexões esporádicas do cone são

$$\Gamma_\phi = -\frac{i}{2}(\alpha - 1)\sigma^3. \quad (4.25)$$

O nosso interesse é encontrar a solução da equação de Dirac sem massa na presença de um campo magnético uniforme, por simplicidade, escolhemos, o campo magnético na direção do eixo z como:

$$\vec{B} = B\hat{e}_z, \quad (4.26)$$

onde B é o módulo do campo magnético \vec{B} . Esta configuração de campo pode ser gerada por um vetor de potencial azimutal, dado por

$$\vec{A} = \frac{B\rho}{2}\phi. \quad (4.27)$$

Por meio do acoplamento mínimo introduzimos este campo magnético na equação de Dirac sem massa, que é escrito como a transformação $i\partial_\mu \rightarrow i\partial_\mu - eA_\mu$ na equação de Dirac (4.16). Isso leva à equação modificada

$$\left[i\gamma^\mu(x)\frac{\partial}{\partial\mu} + i\gamma^\mu(x)\Gamma_\mu - \gamma^\mu(x)eA_\mu - \gamma^\mu(x)\Omega_\mu \right] \psi(x) = 0. \quad (4.28)$$

Depois de algumas manipulações, chegamos a seguinte equação de Dirac

$$i \left[\gamma^t \partial_t + \gamma^\rho \left(\partial_\rho - \frac{1-\alpha}{2\alpha\rho} \right) + \frac{\gamma^\phi}{\alpha\rho} \partial_\phi + \frac{\gamma^\phi e B \rho}{2} - \frac{\gamma^\phi \left(\pm \frac{3}{2}(\alpha-1) \right)}{\rho} \right] \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (4.29)$$

Definindo as matrizes de Dirac em termos dos referenciais locais pela expressão $\gamma^\mu = e_a^\mu \gamma^a$, onde γ^a satisfaz a relação de comutação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$ no espaço de Minkowski, e obedece as seguintes relações:

$$\bar{\gamma}^0 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^0 = \gamma^t, \quad (4.30a)$$

$$\bar{\gamma}^1 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^1 \cos\phi + \gamma^2 \sin\phi = \gamma^\rho, \quad (4.30b)$$

$$\bar{\gamma}^2 = e_a^\mu \gamma^a = \frac{1}{\alpha\rho} (\gamma^2 \cos\phi - \gamma^1 \sin\phi) = \frac{\gamma^\phi}{\alpha\rho}, \quad (4.30c)$$

onde $\gamma \cdot e_\rho = \gamma^\rho$ e $\gamma \cdot e_\phi = \gamma^\phi$ são as projeções da matriz γ no plano polar. Para a separação de variável, utilizamos a transformação de similaridade $S(\phi)$, onde as matrizes γ^ρ e γ^ϕ são reduzidas para as matrizes γ^1 e γ^2 , respectivamente. A transformação de similaridade elimina o termo da conexão spinorial da equação de Dirac. Onde temos:

$$S(\phi) = e^{-\frac{i\phi}{2}\sigma^3}, \quad (4.31)$$

satisfaz as seguintes propriedades:

$$S^{-1}(\phi)\gamma^\rho S(\phi) = \gamma^1, \quad (4.32a)$$

$$S^{-1}(\phi)\gamma^\phi S(\phi) = \gamma^2. \quad (4.32b)$$

Como estamos trabalhando em um espaço-tempo de Minkowski $(2+1)$, é conveniente definir as matrizes de Dirac $\gamma = (\gamma^1, \gamma^2) = (-\gamma^1, -\gamma^2)$, γ^0 e $\beta = \gamma^0$ e Σ são escritas diretamente em termos das matrizes de spin de Pauli 2, ou seja, $\gamma_1 = \gamma^0 \alpha_1 = \gamma^0 \sigma_1$, $\gamma_2 = \gamma^0 \alpha_2 = \gamma^0 \sigma_2$, $\gamma^0 = \sigma_3$ e $\Sigma = \sigma$. Então, usando essa informação e as relações (4.32) e (4.32), transformamos a Equação (4.29) na forma:

$$\left[i\partial_t - i\sigma_1 \left(\partial_\rho - \frac{1-\alpha}{2\alpha\rho} \right) - i\sigma_2 \left(-\frac{i\sigma_3}{2\alpha\rho} + \frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) - \frac{i\sigma_2 e B \rho}{2} + \frac{i\sigma_2 \left(\pm \frac{3}{2}(\alpha-1) \right)}{\rho} \right] \Psi(t, \rho, \phi) = 0, \quad (4.33)$$

onde $\psi(t, \rho, \phi) \equiv S^1(\phi)\Psi(t, \rho, \phi)$. Sendo,

$$-i\sigma_1 \left(\partial_\rho - \frac{1-\alpha}{2\alpha\rho} \right) - i\sigma_2 \left(-\frac{i\sigma_3}{2\alpha\rho} + \frac{1}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial\phi} \right) = -i\sigma_1 \left(\partial_{rho} - \frac{1}{2\rho} \right) - \frac{i\sigma_2}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial\phi}, \quad (4.34)$$

substituindo a equação (4.34) na equação (4.33), ficamos:

$$\left[i\partial_t - i\sigma_1 \left(\partial_\rho - \frac{1}{2\rho} \right) - \frac{i\sigma_2}{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{i\sigma_2 eB\rho}{2} + \frac{i\sigma_2 \left(\pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right)}{\rho} \right] \Psi(t, \rho, \phi) = 0, \quad (4.35)$$

Como:

$$I_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

Assim, escolhemos o ansetz a seguir como a ser considerada como a solução de uma partícula livre em um referencial em repouso, para resolver a equação de Dirac, considerando a independência temporal e a simetria rotacional do pano de fundo,

$$\psi = e^{-iEt + i\left(l + \frac{1}{2}\right)\phi} \begin{pmatrix} XA(\rho) \\ XB(\rho) \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

onde E e l são constantes de separação que podem ser interpretadas como energia e momento angular, respectivamente. O spinor $XA(\rho)$ refere-se a sub-rede A e $XB(\rho)$ refere-se a sub-rede B. O ansatz (4.37) e as transformações de similaridade (4.32) e (4.32) nos permitem escrever o seguinte conjunto de equações diferenciais

$$EXA(\rho) = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) XB(\rho) - i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} - \frac{eB\rho}{2} \pm \frac{\frac{3}{2}(\alpha - 1)}{\rho} \right) XB(\rho), \quad (4.38a)$$

$$EXB(\rho) = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) XA(\rho) + i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} - \frac{eB\rho}{2} \pm \frac{\frac{3}{2}(\alpha - 1)}{\rho} \right) XA(\rho). \quad (4.38b)$$

Substituindo (4.38) em (4.38) e vice-versa, obtemos duas equações diferenciais escritas compactamente como:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} M_\sigma^2 + K_\sigma - \left(\frac{eB\rho}{2} \right)^2 \right] X_\sigma(\rho) = 0, \quad (4.39)$$

com

$$M_\sigma = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right), \quad (4.40a)$$

$$N_\sigma = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right), \quad (4.40b)$$

$$K_\sigma = eBN_\sigma + E^2. \quad (4.40c)$$

$\sigma = \pm 1$, o sinal de mais corresponde à sub-rede A e o sinal de menos corresponde à sub-rede B no grafeno.

Vamos agora resolver a Equação (4.39), então, introduzindo uma nova variável na forma:

$$\xi = \frac{eB\rho^2}{2}. \quad (4.41)$$

Com isso, a equação (4.39) fica na forma mais convencional:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{M_\sigma^2}{4\xi^2} + \frac{K_\sigma}{2eB\xi} - \frac{1}{4} \right] X_\sigma(\xi) = 0. \quad (4.42)$$

Analisando o comportamento assintótico (ou limite assintótico) da equação acima, $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, construímos o seguinte ansatz:

$$X_\sigma(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{|M_\sigma|/2} F(\xi), \quad (4.43)$$

onde $F(\xi)$ são funções hipergeométrico. Então, substituindo $X_\sigma(\xi)$ na equação (4.42), obtemos

$$\left[\xi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + (|M_\sigma| + 1 - \xi) \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{1}{2} \left(|M_\sigma| + 1 - \frac{K_\sigma}{eB} \right) \right] F(\xi) = 0. \quad (4.44)$$

A equação (4.44) é chamada de equação diferencial hipergeométrica confluyente, cuja solução são as chamadas funções hipergeométricas confluentes do primeiro tipo

$$F_{\sigma(\xi)} = F \left(\frac{|M_\sigma|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{K_\sigma}{2eB}, |M_\sigma| + 1, \xi \right) \quad (4.45)$$

4.3 Comportamento Assintótico da função hipergeométrica confluyente e os Níveis de Landau

Expressando as funções hipergeométricas confluentes ou série hipergeométricas confluentes [74] em termos dos polinômios de Laguerre generalizados, temos:

$$F(a, c; x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)x^2}{2!} \dots = \frac{(a)_m x^m}{(c)_m m!}, \quad (4.46)$$

com $c \neq 0, -1, -2, \dots$. No limite assintótico, a função hipergeométrica confluyente é dada por:

$$F(a, c; x \rightarrow \infty) \approx \frac{e^x}{x^{c-a}} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \quad (4.47)$$

onde $\Gamma(a) = (a-1)!$ é a função gamma.

Ao analisar a equação (4.47) concluímos que a função hipergeométrica confluyente se torna nula no limite assintótico apenas quando $\Gamma(a) \rightarrow \infty$, e temos que por definição $\Gamma(-n) = \pm \infty$. Assim, para obter soluções normalizadas para a equação de Dirac sem massa, exigisse que a

série hipergeométrica confluyente (4.46) termine, satisfazemos, equacionando o termo independente a um número inteiro negativo ou zero, isto é,

$$a = 0, -1, -2, -3, \dots = -n. \quad (4.48)$$

Assim, pela condição (4.48) podemos escrever a solução para os spinores de Dirac (4.43) seja normalizada,

$$-n = \frac{1}{2} \left(|M_\sigma| + 1 - \frac{K_\sigma}{eB} \right), \quad (4.49)$$

substituindo na equação (4.49) as expressões para M_σ (4.40), K_σ (4.40) e N_σ (4.40), obtemos:

$$-n = \frac{1}{2} \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right| + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right) - \frac{E^2}{2eB}. \quad (4.50)$$

Com essa condição obtemos os níveis de energia para os spinores de Dirac:

$$E^2 = 2eB \left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left| \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right) \right| - \frac{1}{2} \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} \pm \frac{3}{2}(\alpha - 1) \right) \right], \quad (4.51)$$

com o número quântico $n = 0, 1, 2, \dots$, e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, conectando a quiralidade e confirmando a característica dos níveis de Landau para férmions sem massa representados no grafeno [75], apresentando como já esperado uma degenerescência duas vezes menor que outro nível de energia, e outra peculiaridade é que se observa a existência de estados de energia para o número quântico $n = 0$. A autofunção é dada pela expressão:

$$\psi(t, \rho, \phi) = C e^{-iEt + i(l+1/2)\phi} \left(\frac{eB\rho}{2} \right)^{\frac{|M_\sigma|}{2}} \times e^{-eB\rho^2/4} \rho^{|M_\sigma|} F \left(-n, |M_\sigma| + 1, \frac{eB\rho^2}{2} \right), \quad (4.52)$$

onde C é uma constante do spinor. Como já falado, o parâmetro α assume alguns valores entre o intervalo $0 < \alpha < 1$. Neste caso, como podemos verificar a partir da equação (4.51), a presença do defeito topológico aumenta a energia do sistema quando comparado com a planar, no caso $\alpha = 1$. De outra forma, ao considerar uma estrutura do tipo sela, onde o ângulo α assume valores no intervalo $0 < \alpha < \infty$, a energia é reduzida pela presença do defeito. Observe também que a energia aumenta com o campo magnético. Uma outra peculiaridade é que a partir da condição polinomial, obtemos como resultado o mesmo espectro de energia da equação (4.51). Isso já é esperado devido ao fato de que as duas sub-redes de carbono da estrutura do grafeno, que dão origem a este modelo de dois componentes, são equivalentes.

Capítulo 5

Conclusão

Nesse trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e estruturas do grafeno, isso no limite contínuo em baixas energias no caso para os orbitais π , sendo considerado como um sistema fermiônico dado pela equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com (2+1)-dimensões devido os elétrons serem considerados livres. Introduzimos a ideia de defeitos em cristais, advindos de origem química, elétrica ou estrutural, e a teoria de Einstein-Cartan é o pano de fundo pra compreendê-la.

Vimos também que no capítulo 1, o método de *tight-binding* descreve muito bem a banda de condução e a banda de valência para os orbitais π do grafeno no limite contínuo em baixa energia, permitindo descrever as excitações próximas aos pontos de Fermi. E também que a presença de desclinações modifica a estrutura eletrônica do grafeno devido a decorrência da curvatura introduzida pelo defeito.

O nosso principal foco de compreender a teoria sobre fases geométricas, em específico a fase de Berry. Para isso, a pesquisa fundamentou-se em um conjunto de referências [43]. Assumindo a postura original de M. V. Berry de início, na abordagem do conceito de fase geométrica. Por meio da formulação de Schrödinger, estudamos um sistema quântico não-degenerado governado por um operador Hamiltoniano parametricamente dependente do tempo. Demonstramos o surgimento da fase de Berry definidas as condições de evolução temporal cíclica e adiabática, empregamos a forma do teorema adiabático, justificando a aproximação adiabática. A fase de Berry consiste em uma quantidade física, isto é, mensurável. Berry ainda demonstra que o efeito Aharonov-Bohm pode ser interpretado como um exemplo de fase geométrica.

Com esse conhecimento adquirido, introduzimos defeitos topológicos, desclinações positivas ou negativas, na folha de grafeno e, assim, analisamos o comportamento dos elétrons, sabendo que o grafeno mostra uma ondulação que depende da sua forma estrutural. Foi usado a teoria geométrica de defeitos (processo de Volterra) de Katanaev e Volovich para descrever

um cristal na presença de deslocação na geometria do espaço-tempo curvo, e assim, reescrevemos a equação de Dirac usando a teoria de spinores em um espaço-tempo curvo. Analisamos o comportamento assintótico da função hipergeométrica confluyente, obtemos as energias para os spinores de Dirac.

Como perspectivas de futuros trabalhos podemos sugerir e investigar a dinâmica dos spinores de Dirac na presença de outros tipos de defeitos topológicos, como por exemplo deslocações ou com desclinações e deslocações, verificar se é possível o controle do "gap" entre as bandas de condução e valência, hoje se mostra uma barreira na elaboração de dispositivos eletrônicos.

Uma outra perspectiva é abordar de forma análoga ao caso [76], para o nanocone de grafeno rotacionando, verificar a energia dos elétrons e a mudança de fase geométrica de rotação de spin eletrônico, estendendo a temática para camadas duplas de nanocônes de grafeno, procurando sintetizar esses nanocônes.

Apêndice A

Teorema de Bloch

O teorema de Bloch tem a periodicidade de potencial das Redes de Bravais como sua característica peculiar. De modo que em uma Rede de Bravais perfeita $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ para qualquer \vec{R} . A figura A.1 mostra a ilustração da relação de potenciais mencionada:

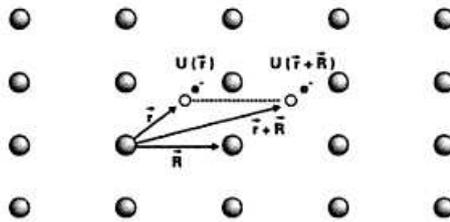


Figura A.1: O Potencial periódico em uma rede de bravais [71].

Na figura acima \vec{r} é a posição de um elétron em relação a um íon escolhido de forma aleatória. Já \vec{R} é a posição de um íon, também escolhido de maneira aleatória, em relação ao mesmo íon referencial do elétron. Devido á periodicidade da Rede, podemos dizer que o elétron representado por \vec{r} está submetido ao mesmo potencial que o elétron representado pela soma vetorial $(\vec{r} + \vec{r})$. Essa periodicidade de potencial traz para a nossa descrição a equação de onda da mecânica quântica para um elétron, a qual pode ser escrita como:

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \Psi = \varepsilon\Psi. \quad (\text{A.1})$$

Feito o trabalho da periodicidade de potencial das Redes de Bravais, podemos enunciar o Teorema de Bloch. O que segundo diz que os autoestados da hamiltoniana monoelétrica $H = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + U(\vec{r})$, onde $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ para todo \vec{R} em uma Rede de Bravais, assumindo a forma de uma onda plana vezes uma função com a periodicidade da Rede de

Bravais: $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ onde $u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Implicando:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (\text{A.2})$$

Veja a figura abaixo, elucida o significado físico da fase $e^{i\vec{k}\vec{R}}$ que aparece quando saltamos de uma célula para outra. Se fosse possível tirar uma foto de uma onda estacionária com vários nós em uma corda seria capaz de ver que os nós tem amplitude zero, contudo nos seguimentos da corda entre nós terão diversos valores de amplitude variando entre um máximo e um mínimo. Agora passe a considerar o espaço entre dois nós como um célula do cristal notara que células vizinhas são diferentes. Essa diferença reside simplesmente na amplitude a qual é a origem física do fator de fase do teorema. A figura A.2 representa a função de onda de uma cadeia linear de átomos e pode-se ver como a amplitude varia em algumas células. A linha tracejada é dada por $e^{i\vec{k}\vec{R}}$.

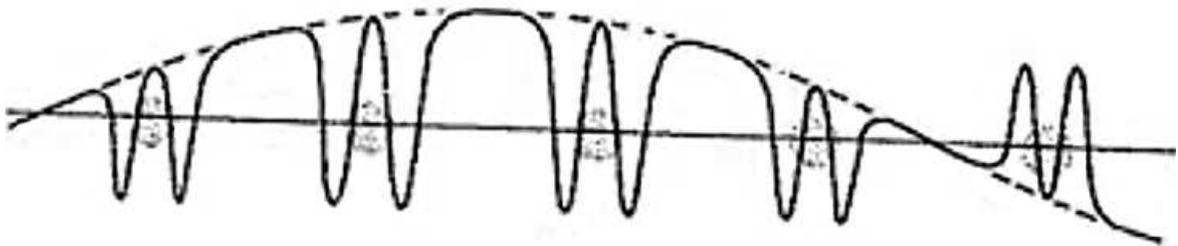


Figura A.2: Função de onda de uma cadeia linear de átomos [72].

Referências Bibliográficas

- [1] K. S. NOVOSELOV, A. K. GEIM *et al*, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, *Science*, **306**, 666 (2004).
- [2] L. D. LANDAU and E. M. LOFSHITZ, *Statistical Physics Part I*, Sections 137 and 138 (Pergamon, Oxford, 1980).
- [3] R. R. NAIR, P. BLAKE, U. M. GRIGORENKO, K. S. NOVOSELOV, T. J. BOOTH, T. STAUBER, N. M. R. PERES e A. K. GEIM, *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*, *Science*, **320**, 1308 (2008).
- [4] C. LEE, X. D. WEI, J. W. KYSAR e J. HONE, *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*, *Science*, **321**, 385 (2008).
- [5] N. D. MERMIN, *Crystalline order in two dimensions*. *Phys. Rev.*, **176**, 250 (1968).
- [6] A. K. GEIM and K. S. NOVOSELOV, *The rise of graphene*. *Nature materials*, **6**, 183 (2007).
- [7] D. C. ELIAS, *Estudo das Propriedades de Transporte Elétrico de Grafeno e de Grafeno Hidrogenado*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, 90 (2009).
- [8] E. FRIEDEN, *The Chemical Elements of Life*, *Scientific American*, 52 (1972).
- [9] H. W. KROTO, J. R. HEATH, S. C. OBRIEN, R. F. CURL, and R. E. SMALLEY, *c₆₀: Buckminsterfullerene*. *Nature*, **318**, 162 (1985).
- [10] H. P. BOEHM, R. SETTON, and E. STUMPP, *Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds*. *Pure and Applied Chemistry*. 66: 1893-1901. doi:10.1351/pac199466091893 (<https://dx.doi.org/10.1351/pac199466091893>), (1994).
- [11] P. DIETL, *Diploma Thesis*, Universitat Karlsruhe, (2009).
- [12] M. R. GUASSI, *Estrutura Eletrônica do Grafeno e Nanofitas: efeitos spin-órbita e strain*. Dissertação (mestrado em Física) - Universidade de Brasília, 74 (2010).

- [13] P. LAMBIN and J. FINK, *Electronic states of carbon materials, Encyclopedia of Condensed Matter Physics*, **1**, Elsevier Science, 142 (2007).
- [14] P. BLAKE, P. D. BRIMICOMBE, R. R. NAIR, T. J. BOOTH, D. JAIANG, F. SCHEDIN, L. A. PONOMARENKO, S. V. MOROZOV, H. F. GLESON, E. W. HILL, A. K. GEIM e K. S. NOVOSELOV, *Graphene-Based Liquid Crystal Devic*, *Nano Lett.*, **8**, 1704 (2008).
- [15] X. WANG, L. ZHI, K. e MULLEN, *Transparent, Conductive Graphene Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells*. *Nano Letters*, **8**, 323 (2008).
- [16] Y. M. LIN, C. DIMITRAKOPOULOS, K. A. JANKINS, D. B. FARMER, H. Y. CHIU, A. GRILL e P. AVOURIS, *100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene*, *Science*, **327**, 662 (2010).
- [17] M. LEITE, *Mackenzie investe 20 milhões de reais em centro de estudos de grafeno*. Folha de São Paulo, São Paulo, (04-02-2019).
- [18] DINO, *Dini investe R\$ 10 milhões em pesquisa no grafeno em colaboração com o Mackenzie*. Disponível em: <<https://www.terra.com.br/noticias/dino/dini-investe-r-10-milhoes-em-pesquisa-nografeno-em-colaboracao-com-o-mackenzie>>. Acesso em: 25 jan. (2019).
- [19] C. SOLDANO, A. MAHMOOD, and E. DUJARDIN, *Production, properties and potential of graphene*, *Carbon*, **48**, 2127 (2010).
- [20] M. QUINTANA, J. I. TAPIA, M. PRATO, *Liquid-phase exfoliated graphene: functionalization, characterization, and applications*. *Beilstein Journal Of Nanotechnology*, 2328 (2014).
- [21] I. D. BARCELOS, *Crescimento de Grafeno por CVD em folhas de Cobre*. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, 81 (2010).
- [22] K. V. EMTSEV, A. BOSTWICK, K. HORN, J. JOBST, G. L. KELLOGG, L. LEY, J. L. MCHESNEY, D. WALDMANN, H. B. WEBER e T. SEYLLER, *Towards wafer-size graphene layers by pressure graphitization of silicon carbide*, *Nature Mat.* **8**, 203 (2009).
- [23] A.-M. B. GONLVES, *Crescimento, Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Grafeno Epitaxial*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, 107 (2012).
- [24] V. M. PEREIRA, R. M. RIBEIRO, N. M. R. PERES, and A. H. C. NETO, *Optical Properties of Strained Graphene*, *Europhysics Letters (EPL)*, **92**, (2010).

- [25] M. C. V. JIOR, *Estudo teórico de monocamada e bicamada de grafeno em superfície de óxido de háfnio amorfo*. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo, 85 (2015).
- [26] C. BENA, and G. MONTAMBAUX, *Remarks on the tight-binding model of graphene*. *New Journal of Physics*, **11**, (2009).
- [27] N. W. ASHCROFT and N. D. MERMIN, *Solid State Physics*, Harcourt College Publishers (USA), (1976).
- [28] I. S. OLIVEIRA, e V. L. B. JESUS, *Introdução à Física do Estado Sólido*. 1 ed., São Paulo: Livraria da Física, (2005).
- [29] A. H. C. NETO, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV, and A. K. GEIM, *The Electronic Properties of Graphene*. *Reviews of Modern Physics*, **81**, 109 (2009).
- [30] M. R. MASIR, D. MOLDOVAN, and F. M. PEETERS, *Pseudo magnetic field in strained graphene: Revisited*. *Solid State Communications*, 175, 76 (2013).
- [31] S. HYDE, S. ANDERSSON, Z. BLUM, T LANDG, S. LIDIN e B. W. NINHAM, *The Language of Shape the role of curvature in condensed matter physics*, Chemistry and Biology, (Elsevier Science, 1997).
- [32] J. E. RIVIERE, *Pharmacokinetics of nanomaterials: an overview of carbon nanotubes, fullerenes and quantum dots*, Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology, **1**, 26 (2009).
- [33] M. O. KATANAEV e I. V. VOLOVICH, *Theory of Defects in Solids and Therre-Dimensional Gravity*, *Ann. Phys.* **216**, 1 (1992).
- [34] H. KLEINERT, *Gauge Fields in condensed matter*, **2**, (World Scientific, Singapore 1989).
- [35] M. O. KATANAEV, *Geometric theory of defects*, [arXiv:cond-mat/0407469v3](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0407469v3) (2005).
- [36] V. L. ROQUE, *Uma solução exata em Einstein-cartan*. Tese (Mestrado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, 79 (1982).
- [37] I. L. SHAPIRO, *Physical aspects of the space-time torsion*, [arXiv:hep-th/0103093v1](https://arxiv.org/abs/hep-th/0103093v1) (2001).
- [38] S. M. CARROLL, *Lecture Notes on General Relativity*, [arXiv:gr-qc/9712019v1](https://arxiv.org/abs/gr-qc/9712019v1) (1997).

- [39] M. NAKAHARA, *Geometry, Topology and Physics*. (Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1982).
- [40] R. A. PUNTIGAN e H. H. Soleng, *Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects*, [arXiv:gr-qc/9604057v2](#) (1997).
- [41] S. CARROLL, *Spacetime and Geometry - An Introduction to General Relativity*. (Addison Wesley, 2004).
- [42] A. VILENKIN and E. P. S. SHELLARD, *Cosmic and Other Topological Defects*. (Cambridge University Press, 1994).
- [43] M. V. BERRY, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **392**, 45 (1984).
- [44] F. Wilczek, A. ZEE, *Appearance of gauge structure in simple dynamical systems*. Physical Review Letters **52**, 2111 (1984).
- [45] L. YANG, B. SHAO, J. ZOU, *Berry phase of many-body system: time-dependent representation method*. The European Physical Journal D **66**, 1 (2012).
- [46] Y. AHARONOV, J. ANANDAN, *Phase change during a cyclic quantum evolution*. Physical Review Letters **58**, 1593 (1987).
- [47] S. PANCHARATNAM, *Generalized theory of interference, and its applications*. In Proceedings of the Indian Academy of Sciences-Section A, **44**, 247 (Springer, 1956).
- [48] J. SAMUEL, R. BHANDARI, *General setting for berry's phase*. Phys. Rev. Lett. **60**, 2339 (1988).
- [49] J. ANANDAN, *Non-adiabatic non-abelian geometric phase*. Physics Letters A **133**, 171 (1988).
- [50] B. R. HOLSTEIN, *The adiabatic theorem and berry's phase*. Am. J. Phys **57**, 1079 (1989).
- [51] P. A. DIRAC, *Quantised singularities in the electromagnetic field*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **60** (1931).
- [52] P. EHRENFEST, *In what way does it become manifest in the fundamental laws of physics that space has three dimensions*. Proc. Amst. Acad. **v.20**, 200 (1916).
- [53] M. BORN, V. FOCK, *Beweis des adiabatenatzes*. Zeitschrift für Physik **51**, 165 (1928).

- [54] T. KATO, *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*. Journal of the Physical Society of Japan **5**, 435 (1950).
- [55] J. C. BUDICH, B. TRAUZETTEL, *From the adiabatic theorem of quantum mechanics to topological states of matter*. physica status solidi (RRL)-Rapid Research Letters, **7**, 109 (2013).
- [56] A. BOHM, H. K. Q. N., A. MOSTAFAZADEH J. ZWANZIGER, *The Geometric Phase in Quantum Systems: Foundations, Mathematical Concepts, and Applications in Molecular and Condensed Matter Physics*, (2003).
- [57] G.F. LEAL FERREIRA, *Argumentando sobre a realidade dos potenciais*. Rev. Bras. Ensino Fís. **vol.26**, São Paulo (2004).
- [58] M. O. KATANAIEV, *Introduction to the Geometric Theory of Defects*, **arXiv:cond-mat/0502123v1**, (2005).
- [59] J. A. JASZCZAK, *Graphite: Flat, fibrous and spherical*. In: Mendenhall GD, Greenberg A, Liebman JF, editors. *Mesomolecules: From molecules to materials*. New York: Chapman Hall, 161 (1995).
- [60] S. IJIMA, T. ICHIHASHI, and Y. ANADO, *Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth*. Nature (London) **356**, 776 (1992).
- [61] A. KRISHNAN, E. DUJARDIN, M. M. J. TREACY, J. HUGDAHL, S. LYNUM, and T. W. EBBESEN, *Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces*. Nature (London) **388**, 451 (1997).
- [62] R. TAMURA, and M. TSUKADA, *Electronic states of the cap structure in the carbon nanotube*. Phys. Rev. B. **49**, 7697 (1994); **52**, 6015 (1995).
- [63] E. B. A. JUNIOR, *Estudo teórico de nanocones e monocamadas dopadas com gálio*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal da Paraíba, 102 (2017).
- [64] J. P. GUEDES, *Propriedades Estruturais e Eletrônicas de defeitos do Tipo vacâncias em nanocones de Carbono e de Nitreto de Boro*. (2010).
- [65] R. A. PUNTIGAM, H. H. SOLENG, *Volterra distortions, spinning strings, and Cosmic defects*, *Class. Quantum Grav.* **14**, 1129 (1997).
- [66] M. S. C. MAZZONI, R. W. NUNES, S. AZEVEDO, *Chamcham*, Physical Review B **73**(073108), (2006).

- [67] M. J. BUENO, *Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal da Paraíba, 99 (2011).
- [68] S. DIMOVSKI, J. A. LIBERA, and Y. GOGOTSI, *A Novel Class of Carbon Nanocones*. (2011).
- [69] C. Furtado, F. MORAES, e M. de M. CARVALHO, *Geometric phase in graphite cones*, Phys. Lett. A, **372**, 5368 (2008).
- [70] V. B. Bezerra, *Some remarks on loop variables, holonomy transformation, and gravitational Aharonov-Bohm effect*. Ann. Phys, **203**, 392 (1990).
- [71] I. S. OLIVEIRA, V. L. B. JESUS, *Introdução á Física do Estado Sólido*. 1 ed. São Paulo: Livraria da Física, (2005).
- [72] N. W. ASHCROFT, N. D. MERMIN, *Física do Estado Sólido*. São Paulo: Cengage Learning, (2011).
- [73] M. NAKAHARA, *Geometry, Topology and Physics* (Cambridge Uni. Press, Cambridge, UK, 1982).
- [74] M. ABRAMOWITZ e I. STEGUN, *Handbrook of the Mathematical Functions*, Nat. Bur. Stand. Appl. Math. (Washinton, D. C., 1965).
- [75] M. J. BUENO, C. FURTADO,^a and A. M. de M. CARVALHO, *Landau levels in graphene layers with topological defects*. Eur. Phys. J. B., 85 (2012).
- [76] J. Q. SHEN, S. HE, and F. ZHUANG, *Aharonov-Carmi effect and energy shift of valence electrons in rotating C60 molecules*, Eur. Phys. J. D **33**, 35 (2005).