

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA



Gabriel Queiroz Garcia

Fases Geométricas para Quasipartículas em Grafeno
na Presença de Deslocação

João Pessoa - PB

2013

GABRIEL QUEIROZ GARCIA

FASES GEOMÉTRICAS PARA QUASIPARTÍCULAS EM GRAFENO NA
PRESENÇA DE DESLOCAÇÕES

Dissertação apresentada ao Curso de
Mestrado em Física da Universidade Fe-
deral da Paraíba, como requisito parcial
para obtenção do Grau de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. CLAUDIO BENEDITO SILVA FURTADO

João Pessoa - PB

2013

G216f Garcia, Gabriel Queiroz.
Fases geométricas para quasipartículas em grafeno na
presença de deslocações / Gabriel Queiroz Garcia.- João
Pessoa, 2013.
68f. : il.
Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN
1. Física. 2. Grafeno. 3. Deslocações. 4. Fase de Berry.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

GABRIEL QUEIROZ GARCIA

FASES GEOMÉTRICAS PARA QUASIPARTÍCULAS EM GRAFENO NA
PRESENÇA DE DESLOCAÇÕES

Dissertação apresentada ao Curso de
Mestrado em Física da Universidade Fe-
deral da Paraíba, como requisito parcial
para obtenção do Grau de Mestre.

Aprovada em Março de 2013.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Claudio Benedito Silva Furtado - Orientador
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes Carvalho - Examinador Externo
Universidade Federal de Alagoas

Prof. Dr. José Roberto Soares do Nascimento - Examinador Interno
Universidade Federal da Paraíba

João Pessoa - PB

2013



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO DE TITULAÇÃO
Mestrado

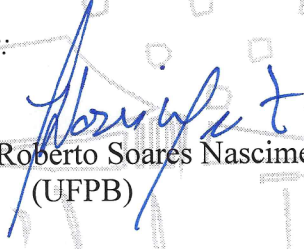
A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 15 de março de 2013, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, APROVA **Gabriel Queiroz Garcia** na defesa de sua dissertação intitulada "*Fases geométricas para quase partículas em grafeno na presença de deslocções*".

João Pessoa, 15 de março de 2013

Orientador:


Prof. Dr. Claudio Benedito da Silva
Furtado
(UFPB)

1º Examinador:


Prof. Dr. Jose Roberto Soares Nascimento
(UFPB)

2º Examinador:


Prof. Dr. Alexandre Carvalho
(UFAL)

Dedico a minha família e para todas as pessoas que me apoiaram até este momento.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço a Deus por chegar onde estou e por tudo de bom que aconteceu de bom comigo, pelas as amizades feita, pelos os momentos difíceis superados e por mais uma etapa concluída. Agradeço também a minha família, por me apoiar nas minhas escolhas mais difíceis da minha vida. Aos meus pais, Henrique Garcia e Glória Garcia, por me tornarem o que eu sou hoje. A minha irmã Stephanie Garcia por ser mais que irmã pra mim. A Eliane André da Cruz por me aguentar mesmo nos piores momentos. Ao prof. Claudio Furtado, agradeço pela sua orientação desde o tempo da graduação e pelo trabalho executado no mestrado. Agradeço também a Knut Bakke e Jilvan Lemos, pessoas que eu aprendi a respeitar e admirar, por ajudar neste trabalho e tirar duvidas. Aos meus amigos de mestrado: Jardson Ricardo, Paulo Porfírio, Tiago Silva, José Amaro, Felipe de Freitas, e Julio Brandão, por esses anos de convivências, pelos momentos bons e ruins vividos e pela grande amizade construída. Agradeço a CAPES pelo o apoio financeiro neste trabalho.

Lista de Figuras

2.1	Formas Gráficas da esquerda para direita: embrulhando temos o fulereno 0D, enrolando temos o nanotubos 1D e empilhando temos o grafite 3D [10].	4
2.2	Espectros de energia das quasipartículas em matéria condensada: A. Portadores de cargas são normalmente descritos pela equação de Schrödinger na matéria condensada. B. Partículas relativísticas no limite da massa de repouso nula. C. A quasipartícula no grafeno descrito por uma equação do tipo Dirac sem massa. D. A camada dupla de grafeno é descrito por um hamiltoniano que é a mistura de Dirac e Schrödinger [8].	6
2.3	Representação dos orbitais atômicos do carbono na rede do grafeno [25]. . .	6
2.4	A. A figura é a representação da rede do grafeno. Os vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são os vetores primitivos da rede. Os vetores $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ são os vetores dos primeiros vizinhos de um sítio na rede. B. A figura corresponde a zona de Brillouin, onde temos a célula unitária da rede recíproca, de modo que K e K' são os pontos de Fermi. Os vetores $\vec{a}_1^*$ e $\vec{a}_2^*$ são os vetores da rede recíproca [35].	7
2.5	Estrutura de banda do grafeno [16].	10
2.6	Defeito linear: Deslocação. A. Na figura temos uma deslocação do tipo edge com o vetor de Burgers perpendicular a linha de corte. B. Na figura temos uma deslocação do tipo scroll com vetor de Burgers paralelo a linha de corte [37].	22
2.7	Defeito linear: Desclinação [43].	23
3.1	Representação do efeito Aharonov-Bohm [52].	32
3.2	Efeito Aharonov-Bohm considerando uma caixa de potencial circundando uma linha de fluxo [45].	33

4.1	Deslocação do tipo Edge com vetor de Burgers na direção radial [57]. . . .	36
-----	--	----

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	vii
Resumo	x
Abstract	xi
1 Introdução	1
2 Grafeno e Defeitos Topológicos	3
2.1 Grafeno	3
2.1.1 Modelo de Tight-Binding para o Grafeno	7
2.1.2 Expansão para Pequenos Momentos	10
2.2 Defeitos em Cristais	12
2.2.1 Torção e Curvatura	14
2.2.2 Referenciais Locais	18
2.2.3 Tipos de Defeitos em Cristais	21
3 Fases de Berry	25
3.1 Processos Adiabáticos	26
3.2 Fases Geométricas	29
3.3 Efeito Aharonov-Bohm	31
3.4 Acoplamento Férmion-Torção	34
4 Fases Geométricas em Grafeno na Presença de Deslocações	35
4.1 Deslocação do Tipo Edge com Vetor de Burgers na Direção Radial	36
4.1.1 Fase Geométrica Abelianas	40

	ix
4.1.2 Fase Geométrica Não-Abeliana	44
4.2 Deslocação do Tipo Edge com Vetor de Burgers na direção x	46
5 Conclusão	51
Referências Bibliográficas	53

Resumo

Recentemente, Mesaros, Sadri e Zaanen investigaram o aparecimento de fases de Berry na dinâmica de quasipartículas em grafeno com deslocções tipo edge. Em contraste com desclinações, as deslocções requerem apenas energias finitas para serem criadas, de modo que é virtualmente impossível preparar um cristal que não contém deslocções. Mesaros, Sadri e Zaanen usaram a teoria da elasticidade clássica, para introduzir as informações devido a deslocção, no hamiltoniano da partícula e usaram método *tight-binding* numa aproximação de contínuo para descrever o sistema. Eles obtiveram que a dinâmica da partícula adquire uma fase de Berry e que esta fase pode ser usadas para aplicações em computação quântica. Neste trabalho, usamos a teoria geométrica de defeitos de Katanaev e Volovich para introduzir deslocções em uma folha de grafeno em uma aproximação de contínuo. Obtemos a métrica que descreve uma deslocção tipo edge. Obtemos o hamiltoniano que descreve a dinâmica das quasipartículas no grafeno neste espaço curvo com torção. Escrevemos a equação de Dirac para esse sistemas e investigamos o aparecimento de fases de Berry neste sistema. Mostramos que a fase geométrica obtida para o nosso sistema depende da intensidade do vetor de Burgers.

Palavras-chave: Grafeno. Deslocações. Fase de Berry.

Abstract

Recently, Mesaros, Sadri and Zaanen investigated the rise of Berry phases in the dynamics of quasiparticle in graphene with edge dislocation. In opposition with disclinations, dislocations require only finites energies to be created so that is virtually impossible to prepare one crystal, which doesn't have dislocations. Mesaros, Sadri e Zaanen used the theory of classic elasticity, to introduce informations due deslocations, in the Hamiltonian of particle and also used tigth-binding method to describe the system. They obtained that dynamics particle acquires one Berry phase and which this phase can be used at applications in quantic computation. In this work, we use the Katanev and Volovich geometric theory of defects to introduce dislocations in the graphene's sheet. We obtain the metric which descibe edge dislocations. We obtain the Hamiltonian which descibe the dynamic of quasiparticle in the graphene at curved space-time with torsion. Write the Dirac equation to this system and investigate the rise of Berry phase in this system. We show that Berry phase obtained to our system depends of intensity of Burgers vector.

Keywords: Graphene. Dislocations. Barry's Phase.

Capítulo 1

Introdução

Nesta dissertação vamos estudar a influência de um defeito topológico na dinâmica de uma quasipartícula no grafeno, em particular estudaremos a influência de uma deslocação. Recentemente vários artigos vem estudando a influência de defeitos no grafeno, como por exemplo [1, 2, 3, 4], e tem mostrado que a presença de pares pentágono-heptágono representa uma deslocação no grafeno. Em particular, Mesaros, Sadri e Zaanen publicaram um trabalho no qual obtiveram que a dinâmica da quasipartícula no grafeno adicionando uma fase de Berry após uma mudança no referencial local [5]. Eles obtiveram neste resultado utilizando a teoria da elasticidade no hamiltoniano da quasipartícula, para assim introduzir informações sobre o defeito. Neste trabalho desenvolvemos um método geométrico para mostrar o surgimento da fase de Berry encontrado por Mesaros, Sadri e Zaanen, a partir da teoria geométrica de defeitos desenvolvida por Katanaev e Volovich [6]. Esta fase tem grande importância na área de computação holonômica. A partir da obtenção de fases de Berry no grafeno podemos descrever portas lógicas na computação, de modo que o grafeno torna-se uma alternativa para a criação de dispositivos eletrônicos.

No Capítulo 2 desta dissertação, em primeiro lugar, vamos discutir sobre o grafeno, abordando suas propriedades físicas, eletrônicas, cristalinas, e até estrutural. Deste modo teremos um apanhado geral sobre o seu desenvolvimento, método de criação, e momentos relevantes a física envolvendo o grafeno. Após este breve apanhado sobre o grafeno, vamos mostrar que para método de *tight-binding* no grafeno, numa aproximação para pequenos momentos, a interação entre o elétron e o ponto de Fermi vai apresentar uma dispersão linear, de modo que podemos descrever a quasipartícula no grafeno através de uma

equação de Dirac. Adiante, descrevemos a teoria geométrica de defeitos desenvolvida por Katanaev e Volovich, e apresentamos a ferramenta matemática utilizada na dissertação: a geometria de espaço-tempo curvo, utilizando tensores e formas diferenciais. Para finalizar, falamos sobre os tipos de defeitos existentes em cristais, como eles são obtidos a partir dos processos de Volterra, e relacionando-os com aspectos do espaço-tempo curvo: torção e curvatura.

No Capítulo 3 vamos falar sobre fase de Berry. Vamos apresentar e provar o teorema adiabático. Então, mostraremos como obter uma fase quântica devido a geometria do sistema. Aqui também mostramos que esta fase é invariante sob uma transformação de *gauge*. Por fim, apresentamos aqui o efeito Aharonov-Bohm como um exemplo de fase geométrica. No capítulo 4, desenvolvemos um método geométrico e mostramos o surgimento de fases de Berry no grafeno devido a influência de uma deslocação do tipo edge. No capítulo 5 apresentamos as conclusões do trabalho e as expectativas futuras em relação a aplicação do método descrito nesta dissertação. Em toda dissertação faremos $\hbar = c = 1$.

Capítulo 2

Grafeno e Defeitos Topológicos

2.1 Grafeno

O grafeno é um cristal formado por uma rede hexagonal de átomos de carbono, sendo assim estritamente bidimensional. Este material exibe propriedades excepcionais, tanto mecânicas, quanto eletrônicas e cristalinas. O carbono se liga na rede através de duas ligações simples e uma ligação dupla com os seus três vizinhos mais próximos. É o material mais fino do universo, ao mesmo tempo o material mais forte já medido. Sua carga exibe uma gigante mobilidade, devido a sua massa efetiva ser nula, e pode viajar por micrômetros sem ser espalhado em temperatura ambiente. O transporte de elétrons no grafeno é descrito por uma equação do tipo Dirac, por isso ele tem levado ao surgimento de um novo paradigma de modo que fenômenos quânticos relativísticos podem ser imitados e testados, ou seja, um laboratório de altas energias. A potencialidade do grafeno é muito grande, e cada vez mais pesquisadores estudam sobre o mesmo [1, 2, 3, 4].

Planos atômicos já são bem conhecidos como parte do bulk de um cristal, porém um plano totalmente isolado com espessura de um átomo ainda não tinha sido objeto de estudo. De fato na década de 30, Landau e Peierls demonstraram nos seus trabalhos que cristais 2D são termodinamicamente instáveis [17, 18], ou seja, flutuações térmicas em rede cristalina com baixa dimensão levam ao átomo se deslocar uma distância na ordem das distâncias entre átomos, causando a instabilidade do cristal. Por este fato, até 2004 acreditou-se que não existiam cristais ordenados em 2D, sem uma base 3D. A impossibilidade do crescimento de cristais 2D não significa que eles não possam ser criados

artificialmente.

Em 2004 o cristal de grafeno [21] e outros cristais 2D foram descobertos. O cristal de grafeno esta sendo produzido de duas formas: a partir do substrato, através da esfoliação e do crescimento epitaxial [19], e também na forma de uma folha autônoma [20]. Por esta descoberta Andre Geim e Konstantin Novoselov receberam o prêmio Nobel em física no ano de 2010. Uma grande variedade de aplicações práticas é possível com a exploração das propriedades do grafeno, como a criação de novos materiais e a produção de dispositivos elétricos inovadores. Estimam-se que os *chips* de grafeno serão muito mais eficientes do que os de silício, viabilizando o desenvolvimento de computadores mais eficazes. Devido as suas propriedades ele é tido como uma mina de ouro para os pesquisadores da área.

Podemos rearranjar o grafeno de algumas formas diferentes: embrulhando temos o fulereno, enrolando temos os nanotubos de carbono e empilhando temos o grafite, ver Fig.2.1.

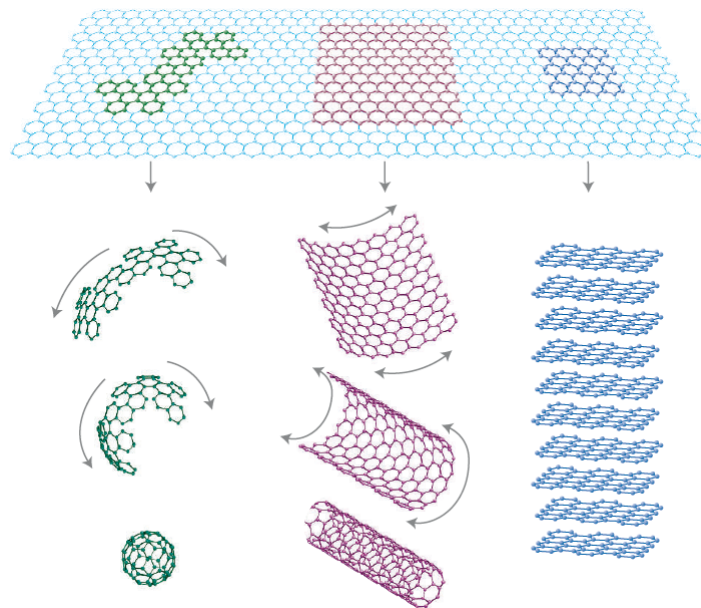


Figura 2.1: Formas Gráficas da esquerda para direita: embrulhando temos o fulereno 0D, enrolando temos o nanotubos 1D e empilhando temos o grafite 3D [10].

Até então, na matéria condensada não se conhecia material com propriedades eletrônicas tão únicas e diferentes. Os materiais conhecidos eram descritos pela a equação de Schrödinger, que não funciona para portadores de carga sem massa. No grafeno, por sua vez, os elétrons próximos aos pontos de Fermi são descritos por quasipartículas que

obedecem uma equação de Dirac sem massa. Outra vantagem do grafeno é que o elétron se propaga, por vários micrômetros sem ser espalhado, na sua própria camada com a espessura do tamanho de um átomo, tornando-se assim muito mais fácil a sua detecção através de uma varredura por uma sonda, e também a sua sensibilidade na presença de materiais tais como dielétricos, supercondutores, ferromagnéticos, entre outros. No grafeno, os efeitos quânticos são claramente observados, devido que os elétrons no grafeno abrangem distância na ordem de micrômetros sem ser espalhados. Deste modo, devido a sua massa efetiva ser nula, esses efeitos permanecem mesmo, sobrevivendo até mesmo à temperatura ambiente. Na Fig. 2.2 temos os espectros de energia das quasipartículas trabalhadas na matéria condensada. Naturalmente as pesquisas iniciais nos mostraram a diferença dos efeitos quânticos entre o grafeno com a equação de Dirac sem massa e os efeitos já bem conhecidos devido a equação de Schrödinger. Entre os efeitos já testados experimentalmente temos: Tunelamento de Klein [22], o efeito hall anômalo [11], absorção ótica definida pela constante de estrutura fina [23], etc.

A maleabilidade no grafeno é incrível. Deste modo, ao aplicar uma tensão ou deformação, podemos alterar suas propriedades eletrônicas, óticas e cristalinas. De fato, quando aplicarmos uma tensão sobre o grafeno teremos a criação de um campo de *gauge* local [16], ou até mesmo alteraremos a estrutura de banda do grafeno.

A estrutura de banda é formada por uma banda de valência (completamente ocupada) e por uma banda de condução (vazia) com a forma cônica e se encontrando no vértice, chamado de ponto de Fermi, ver Fig.2.2. Cada carbono está ligado aos seus 3 vizinhos mais próximos através de uma ligação dupla e duas simples (ver Fig.2.3), ou seja, temos três ligações σ e uma ligação π . As ligações σ são responsáveis pela robustez da estrutura da rede em todos os alótropos. Por causa do princípio da exclusão de Pauli, as bandas σ estão completamente preenchidas, ou seja, são as bandas de valência. O orbital p_z , que está perpendicular ao plano, pode se ligar de forma covalente através de uma ligação do tipo π . A banda π não está completamente preenchida [16]. Vemos então que a banda σ será responsável pelas propriedades mecânicas do grafeno, e a banda π será responsável pelas propriedades eletrônicas.

Um dos métodos de obtenção do grafeno mais promissor é o crescimento epitaxial. Este método trata da decomposição de gases ou vapores contendo átomos de carbono, e fazendo uso de substratos onde os átomos possam ser depositados para formarem o

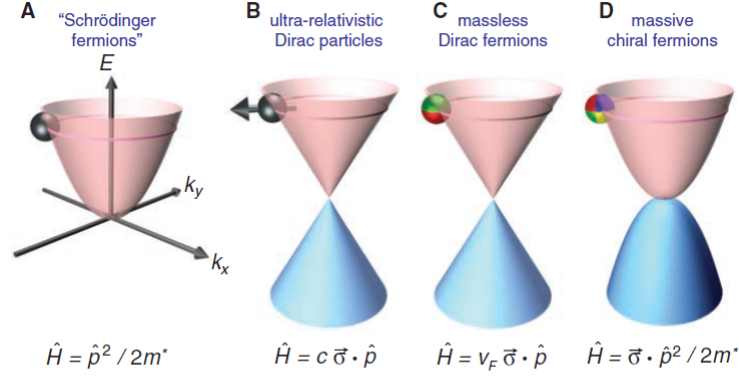


Figura 2.2: Espectros de energia das quasipartículas em matéria condensada: **A.** Portadores de cargas são normalmente descritos pela equação de Schrödinger na matéria condensada. **B.** Partículas relativísticas no limite da massa de repouso nula. **C.** A quasipartícula no grafeno descrito por uma equação do tipo Dirac sem massa. **D.** A camada dupla de grafeno é descrito por um hamiltoniano que é a mistura de Dirac e Schrödinger [8].

grafeno [26]. Por exemplo, uma das variações desse método consiste em aquecer o grafite e o rutênio a uma certa temperatura na qual os átomos de carbono são absorvidos pelo rutênio. Logo depois há um processo de resfriamento no qual os átomos de carbono se organizam na superfícies do rutênio formando a primeira camada de grafeno. Prosseguindo com o resfriamento uma segunda camada é formada. A primeira camada esta fortemente ligada a superfície de rutênio, de modo que é difícil retirar essa camada, enquanto que a segunda camada já não esta fortemente aderida ao substrato sendo possível retirá-la, e assim é obtida a folha única de grafeno [27].

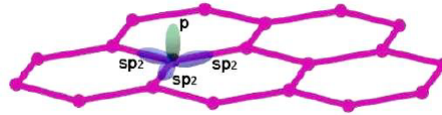


Figura 2.3: Representação dos orbitais atômicos do carbono na rede do grafeno [25].

A seguir faremos a aproximação de *tight-binding* para o grafeno. Neste modelo encontraremos a dispersão linear e a equação de Dirac para quasipartículas sem massa.

2.1.1 Modelo de Tight-Binding para o Grafeno

O grafeno é uma rede arranjada na forma hexagonal, ver Fig.2.4. Note que a rede hexagonal pode ser visto como a sobreposição de duas sub-redes triangulares A/B . Deste modo, vemos que a célula unitária do grafeno é composta por dois átomos, cada um pertencendo a uma sub-rede A/B (Em toda dissertação faremos $\hbar = c = 1$).

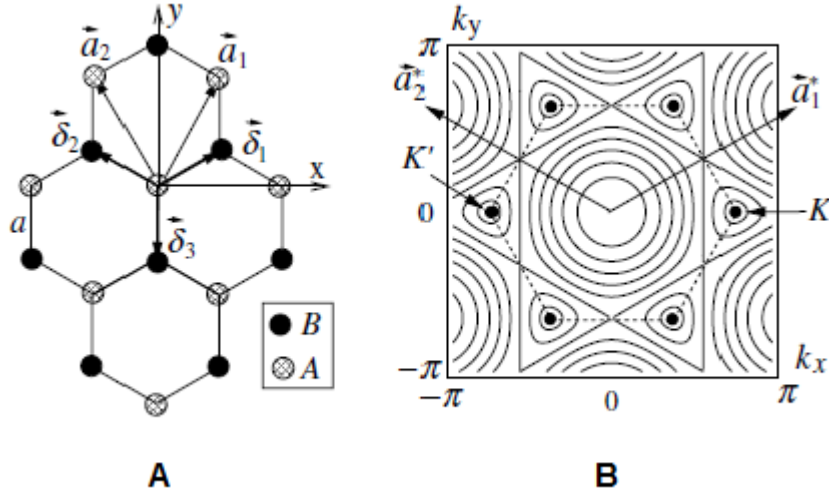


Figura 2.4: **A.** A figura é a representação da rede do grafeno. Os vetores $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são os vetores primitivos da rede. Os vetores $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ são os vetores dos primeiros vizinhos de um sítio na rede. **B.** A figura corresponde a zona de Brillouin, onde temos a célula unitária da rede recíproca, de modo que K e K' são os pontos de Fermi. Os vetores $\vec{a}_1^*$ e $\vec{a}_2^*$ são os vetores da rede recíproca [35].

Podemos escrever os vetores primitivos da rede como:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3). \quad (2.1)$$

Onde a é a distância entre os sítios da rede. Pela a relação $\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, podemos escrever os vetores da rede recíproca:

$$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1), \quad \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1). \quad (2.2)$$

A posição especificada de cada célula unitária no grafeno é dada por,

$$\vec{R}_j = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2, \quad (2.3)$$

onde o índice que rotula o vetor $\vec{R}$ é $j = (n, m)$.

Os primeiros vizinhos mais próximos de um sítio, assim como os pontos de Fermi K e K' , como mostrados na Fig.2.4, são escritos da forma,

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \vec{\delta}_3 = a(0, -1); \quad (2.4)$$

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

Note que a célula unitária da rede do grafeno é formado por dois átomos das duas sub-redes. Agora vamos nos utilizar do Teorema de Bloch para escrever os auto-estados do hamiltoniano da rede. O Teorema de Bloch [30] está enunciado logo abaixo.

Teorema 2.1.1 (Bloch) *O auto-estado ψ do hamiltoniano de um elétron $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$, onde $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ é um potencial periódico, para todo $\vec{R}$ na rede de Bravais, pode ser escolhido ter a forma de uma onda plana vezes uma função contendo a periodicidade da rede Bravais:*

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

de modo que,

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{a}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

No modelo de *tight-binding* as auto-funções do hamiltoniano são descritas como a combinação linear das auto-funções atômicas. Então, primeiro tomaremos a combinação linear das auto-funções dos átomo presentes na célula unitária e então em seguida colocaremos um fator de fase [30],

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= c^A(\vec{k})\Psi_{\vec{k}}^A(\vec{r}) + c^B(\vec{k})\Psi_{\vec{k}}^B(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \left[c^A(\vec{k})\phi(\vec{r} - \vec{R}_j^A) + c^B(\vec{k})\phi(\vec{r} - \vec{R}_j^B) \right], \end{aligned} \quad (2.6)$$

aqui N é o número de células unitárias e $\phi(\vec{r})$ é a função de onda dos orbitais p_z dos átomos de carbono. Os índices A/B rotulam os átomos de cada sub-rede. Devido a arbitrariedade da escolha da origem, da posição dos eixos, e por simplicidade, escolheremos que a posição da célula unitária seja dada a partir dos átomos da sub-rede A , ou seja, $\vec{R}_j^A = \vec{R}_j$ e, por consequência, podemos escrever o átomo da sub-rede B como a soma entre o vetor que especifica a posição da célula unitária e o vetor posição do primeiro vizinho $\vec{R}_j^B = \vec{R}_j + \vec{\delta}_3$.

Na aproximação de *tight-binding* os elétrons que estão num determinado sítio A/B podem saltar para um dos seus três primeiros vizinhos na sub-rede B/A , respectivamente. De modo que, o hamiltoniano terá que apresentar termos que transforma uma auto-função de um átomo na sub-rede A/B na auto-função de um átomo que esta na sub-rede B/A . O hamiltoniano de *tight-binding* é,

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (|\phi_j^A\rangle \langle \phi_i^B| + h.c.) . \quad (2.7)$$

O segundo termo é o hermitiano conjugado do primeiro termo. Na notação de bras e kets temos que a função de onda pode ser escrita como $\phi(\vec{r} - \vec{R}_j^{A/B}) = \langle \phi_j^{A/B} | \vec{r} \rangle$. Aqui t é o parâmetro de hopping que dá a probabilidade de um elétron numa sub-rede A/B pular para a sub-rede B/A respectivamente. Preste atenção também que, a base desse espaço é formada por dois auto-estados $\{|\phi_j^A\rangle, |\phi_j^B\rangle\}$ que representam os auto-estados de átomos de cada sítio na célula unitária.

Deste ponto, temos que o próximo passo trata-se de encontrar as auto-funções para os coeficientes $c^A(\vec{k})$ e $c^B(\vec{k})$. A partir do calculo de $\langle \phi_j^{A/B} | \mathcal{H} | \Psi_k \rangle$, e utilizando a equação (2.6) sabendo que $\langle \Psi_k | \vec{r} \rangle = \Psi_k(\vec{r})$, obtemos duas equações relacionando estes dois coeficientes. Deste modo,

$$\begin{aligned} \epsilon(\vec{k}) c^A(\vec{k}) &= -t \left(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + 1 \right) c^B(\vec{k}); \\ \epsilon(\vec{k}) c^B(\vec{k}) &= -t \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + 1 \right) c^A(\vec{k}). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Definindo,

$$f_0(\vec{k}) = -t \left(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + 1 \right), \quad (2.9)$$

podemos escrever o hamiltoniano na forma matricial,

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f_0(\vec{k}) \\ f_0^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Resolvendo a equação de auto-valores, temos que

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm |f_0(\vec{k})| = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \cos(3k_y a/2)}. \quad (2.11)$$

O espectro de energia do grafeno representado pela equação (2.11) é mostrada na Fig.(2.5). É interessante ver o que acontece quando multiplicarmos a equação (2.9) pela fase $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3}$:

$$f(\vec{k}) = -t \left(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right). \quad (2.12)$$

Onde $\vec{\delta}_i$ com $i = 1, 2, 3$ são os vetores dos primeiros vizinhos. E também $|f(\vec{k})| = |f_0(\vec{k})|$. Deste modo podemos reescrever o hamiltoniano (2.10) na forma usual encontrada na literatura,

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{i=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_i} \\ -t \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_i} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

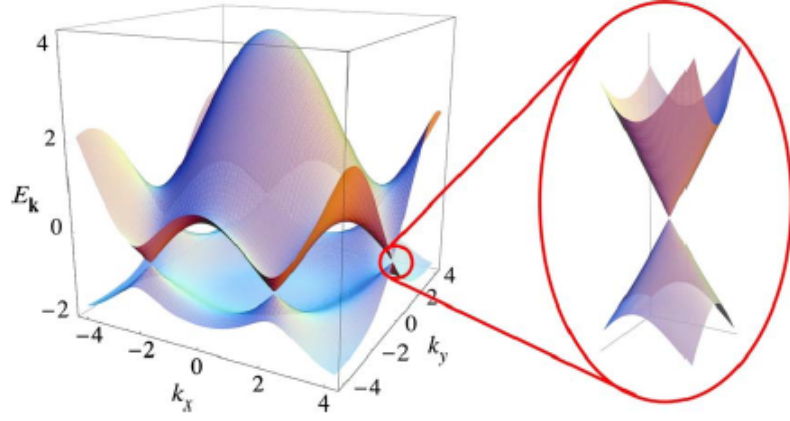


Figura 2.5: Estrutura de banda do grafeno [16].

2.1.2 Expansão para Pequenos Momentos

Nesta seção vamos expandir o hamiltoniano numa aproximação de pequenos momentos, de modo que mostraremos que a quasipartícula no grafeno é descrita por uma equação do tipo Dirac sem massa. Podemos escrever qualquer ponto de Fermi na rede recíproca pela forma:

$$\vec{k}_{mn}^{\xi} = \xi \frac{\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*}{3} + m\vec{a}_1^* + n\vec{a}_2^*. \quad (2.14)$$

O índice $\xi = \pm 1$ rotula os dois vales do espaço recíproco, pois assim como a rede do grafeno sua célula unitária contém dois pontos de Fermi. Note que as equações (2.5), assim como mostrados na Fig.(2.4), são $\vec{K} = \vec{k}_{00}^+$ e $\vec{K}' = \vec{k}_{00}^-$. O produto interno entre o ponto de Fermi e os vetores primitivos da rede (2.1) são:

$$\vec{k}_{mn}^{\xi} \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi\xi}{3} + 2m\pi, \quad \vec{k}_{mn}^{\xi} \cdot \vec{a}_2 = -\frac{2\pi\xi}{3} + 2n\pi. \quad (2.15)$$

Agora vamos fazer o momento ser $\vec{k} = \vec{k}_{mn}^\xi + \vec{q}$, onde $\vec{k}_{mn}^\xi$ são os pontos de Fermi. Considerando que $|\vec{q}| \ll |\vec{k}_{mn}^\xi|$ e expandindo a equação (2.9), lembrando (2.1), temos:

$$\begin{aligned} f_0^\xi(\vec{k}) &= t \left[\xi \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{q} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) - \frac{i}{2} \vec{q} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \right], \\ f_0^\xi(\vec{k}) &= v_f (\xi q_x - i q_y). \end{aligned} \quad (2.16)$$

O fator $v_F = 3at/2$ é conhecido como a velocidade de Fermi. Voltando na equação (2.10), temos que o hamiltoniano será:

$$\mathcal{H} = -iv_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}, \quad (2.17)$$

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

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Para cada ponto de Fermi há uma equação (2.17). De fato, podemos escrever o hamiltoniano do grafeno como uma equação do tipo Dirac para férmions sem massa:

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0. \quad (2.19)$$

Onde ψ é o spinor com 4 componentes da equação de Dirac. Note que mesmo não sendo um sistema relativístico, o grafeno nessa aproximação se comporta como tal. A partir do formalismo quântico relativístico da equação de Dirac podemos verificar vários efeitos quânticos que ocorrem, como já foi citado acima. Além disso, podemos também obter efeitos devido a geometria do espaço. A equação acima indica que o grafeno é um sistema (2+1)-dimensional, de modo que podemos ter efeitos devido a defeitos topológicos no espaço-tempo.

Para o estudo de defeitos em matéria condensada é necessário complicadas condições de contorno na teoria da elasticidade. Nos anos 90 os pesquisadores Katanaev e Volovich demonstraram que esses defeitos poderiam ser descritos mais simplesmente através da geometria diferencial [6], como feito para defeitos em gravitação, tomando o limite contínuo. Neste limite o cristal é descrito por uma variedade, um espaço-tempo curvo com complicada topologia mas que se parece localmente com espaço-tempo de Minkowski, onde curvatura e torção estão relacionadas respectivamente com desclinação e deslocação. No grafeno a substituição de alguns hexágonos por pentágonos (curvatura positiva) ou

heptágonos (curvatura negativa) temos a introdução da curvatura. A deslocação pode ser formada juntando um pentágono e um heptágono através de uma linha que será representado pelo vetor de Burgers da deslocação. Na próxima seção descreveremos a formulação de defeitos em cristais através da geometria diferencial, assim como os tipos de defeitos que ocorrem em cristais.

2.2 Defeitos em Cristais

A criação de cristais em laboratórios sempre se depara com um obstáculo: o aparecimento de defeitos no crescimento de cristais. De fato, seja de origem química, elétrica ou estrutural, é fato que esses cristais crescem com muitos defeitos. Vamos considerar um cristal em três dimensões perfeito, infinito e sem nenhuma força externa aplicada sobre ele. Podemos descrever os sítios da rede desse cristal como,

$$\vec{x} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3. \quad (2.20)$$

Para este cristal ideal, vamos definir um sistema de referência em relação a x^i , com $i = 1, 2, 3$, onde não há deformação no meio e podemos descrever o mesmo através de uma métrica euclidiana $\delta_{ij} = \text{diag}(+ + +)$. Assumindo agora que forças externas atuam sobre este cristal, a rede cristalina irá sofrer deformações e as novas posições dos sítios da rede serão afetadas pelo campo vetorial deslocamento $\vec{u}(x) = \vec{u}(x')$. Deste modo no sistema de referência cartesiano inicial temos,

$$x'_i = x_i + u_i(x). \quad (2.21)$$

Temos que ter cuidado pois na presença de um defeito as coordenadas x^i não abrangem todo o $\mathbb{R}^3$, então assumimos que os campos dependem do sistema de coordenadas que abrange todo o espaço após a deformação x' . Após a deformação do cristal, a distância infinitesimal entre dois pontos será,

$$dx'_i = dx_i + \partial_j u_i(x) dx_j, \quad (2.22)$$

o comprimento é dado por $dl = \sqrt{dx_i^2}$, assim

$$dl' = (dl^2 + 2\epsilon_{ij} dx_i dx_j). \quad (2.23)$$

O tensor ϵ_{ij} é chamado de tensor deformação e podemos escreve-lo na forma,

$$\epsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i u_l \partial_j u_l). \quad (2.24)$$

no limite para a teoria da elasticidade linear temos que $\partial_j u_i \ll 1$. O tensor deformação pode ser escrito como:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (2.25)$$

A suavidade do campo vetorial $u(x)$ nos diz que não há defeitos. Já a presença de singularidades e descontinuidades do deslocamento é interpretado como defeitos no meio elástico. Vamos considerar deformações estáticas, onde o deslocamento não depende do tempo. As equações básicas de equilíbrio para pequenas deformações são [6, 36],

$$\partial_i \sigma^{ij} + f^j = 0; \quad (2.26)$$

$$\lambda \delta^{ij} \epsilon_k^k + 2\mu \epsilon^{ij} = \sigma^{ij}, \quad (2.27)$$

onde σ^{ij} é o tensor tensão. As constantes λ e μ corresponde as propriedades elásticas do meio e são conhecidos como coeficientes de Lamé [36]. A equação (2.26) corresponde a equação de Newton, e as funções f^j descrevem a densidade total das forças não-elásticas no meio. A equação (2.27) que relaciona o tensor tensão com o tensor deformação e corresponde à lei de Hook [6, 36, 37].

Note que o levantamento e abaixamento de índices é feito pela métrica euclidiana δ_{ij} e pela sua inversa δ^{ij} . Note também que para o regime de pequenas deformações o levantamento e o abaixamento de índices é frequentemente esquecido, devido a não diferenciação dos índices em cima ou em baixo. Entretanto, na presença de defeitos, precisamos da ajuda da métrica riemanniana para realizar o abaixamento ou levantamento. A descrição da teoria da elasticidade através de geometria riemanniana é dada quando consideremos translações infinitesimais que levam de um ponto x^μ para um ponto x'^μ no espaço-tempo, que equivale ao campo deslocamento com sinal contrário. O mapa (2.21) é um difeomorfismo do espaço Euclidiano $\mathbb{R}^3$ [37]. Então, para o estado deformado, a métrica na aproximação linear será dada por

$$g_{ij}(x) = \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} \frac{\partial x'^l}{\partial x^j} \delta_{kl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\epsilon_{ij}. \quad (2.28)$$

Com $\epsilon_{ij}(x) = \epsilon_{ij}(x')$ e $\partial u_j / \partial x^i = \partial u_j / \partial x'^i$ na aproximação linear, e a última igualdade é para pequenas deformações. Ao deformarmos um cristal ideal, que apresenta uma

métrica euclidiana, seu meio será deformado com métrica não-trivial. Em consequência as ondas elásticas que se propagam no meio não terá uma trajetória reta, pois para um observador externo a geodésica, nesse meio deformado, é curva mesmo se o tensor de curvatura é identicamente nulo. Da expressão (2.28) podemos descrever as deformações de uma rede cristalina através da geometria diferencial. Com a ajuda da geometria diferencial podemos associar deslocamentos com torção e desclinações com curvatura. Esta formulação foi obtida por Katanaev e Volovich [6, 37]. Na próxima seção faremos uma pequena revisão sobre geometria diferencial, encontrando expressões para os tensores de torção e curvatura.

2.2.1 Torção e Curvatura

Nesta seção vamos apresentar os conceitos básicos da geometria de espaços curvos. Considere o espaço-tempo dado pela métrica $g_{\mu\nu}$ e por uma conexão afim Γ , a geometria deste espaço-tempo é definida na variedade diferenciável $\mathbb{M}$, onde a sua dimensão é $\dim(\mathbb{M}) = m$. Aqui, assumimos também que a variedade $\mathbb{M}$ é difeomorfa ao espaço Euclidiano $\mathbb{R}^m$, de modo que todos os campos são dados por funções suaves $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{M})$, exceto para possíveis pontos singulares. A distância infinitesimal entre dois pontos no espaço-tempo é dada por,

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^\mu dx^\nu \quad (2.29)$$

A expressão (2.29) é o elemento de linha do espaço-tempo¹. A métrica $g_{\mu\nu}$ é dada por um tensor covariante de ordem 2, que define o produto escalar no espaço-tempo, onde este tensor apresenta duas propriedades importantes: i) Os dois índices do tensor são simétricas $g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$; ii) o determinante é não-nulo $g = |g_{\mu\nu}| \neq 0$. A partir das propriedades descritas acima, podemos definir então a inversa da métrica $g^{\mu\nu}$,

$$g^{\mu\nu}g_{\nu\tau} = g_{\tau\beta}g^{\beta\mu} = \delta^\mu_\tau \quad (2.30)$$

Se neste espaço-tempo, definido por (2.29), aplicarmos a derivada espacial num campo escalar teremos um vetor covariante. Entretanto, quando aplicamos esta operação

¹Estamos utilizando a notação de Einstein onde a repetição de índices significa a omissão do símbolo do somatório, ou seja, para índices repetidos temos uma soma.

num tensor, ou mesmo num vetor, não teremos mais um tensor. De fato, precisamos introduzir a noção de derivada covariante para resolver este problema. A derivada covariante vai atuar como um operador de derivada parcial, de modo a não depender do sistema de coordenadas. Para isto temos que somar a derivada parcial um termo adicional de modo que a soma seja um tensor, que corresponda a transformação linear do sistema de coordenadas. Esse termo de correção é dado pela conexão afim Γ . De modo que, a derivada covariante para um vetor contravariante A^ν ,

$$\nabla_\mu A^\nu = \partial_\mu A^\nu + \Gamma_{\mu\alpha}^\nu A^\alpha. \quad (2.31)$$

a derivada covariante transforma um tensor de ordem (k, l) num tensor $(k, l+1)$, e obedece as seguintes propriedades:

1. Linearidade: $\nabla(T + S) = \nabla T + \nabla S$;
2. Regra de Leibniz: $\nabla(T \otimes S) = \nabla T \otimes S + T \otimes \nabla S$.

A conexão afim se transforma de maneira diferente de tensores,

$$\Gamma_{\mu'\nu'}^{\rho'} = \frac{\partial x^\mu}{\partial x^{\mu'}} \frac{\partial x^\nu}{\partial x^{\nu'}} \Gamma_{\mu\nu}^\rho \frac{\partial x^{\rho'}}{\partial x^\rho} + \frac{\partial^2 x^\rho}{\partial x^{\mu'} \partial x^{\nu'}} \frac{\partial x^{\rho'}}{\partial x^\rho}. \quad (2.32)$$

vamos agora aplicar a operação de derivação covariante num campo escalar, que vai se transformar num vetor covariante:

$$\nabla_\mu (A^\nu B_\nu) = \partial_\mu (A^\nu B_\nu), \quad (2.33)$$

de modo que podemos definir a derivada covariante para um tensor covariante da forma,

$$\nabla_\mu B_\nu = \partial_\mu B_\nu - \Gamma_{\mu\nu}^\alpha B_\alpha. \quad (2.34)$$

Generalizando a derivada covariante para um tensor de ordem arbitrária temos,

$$\nabla_\beta T_{\gamma_1 \dots}^{\alpha_1 \dots} = \partial_\beta T_{\gamma_1 \dots}^{\alpha_1 \dots} + \Gamma_{\beta\lambda}^{\alpha_1} T_{\gamma_1 \dots}^{\lambda \dots} + \dots - \Gamma_{\beta\gamma_1}^\tau T_{\tau \dots}^{\alpha_1 \dots} - \dots \quad (2.35)$$

Agora devemos encontrar a expressão para a conexão afim. Utilizando a condição que a métrica deve ser sempre constante, ou seja, sua derivada covariante deve ser sempre nula $\nabla_\tau g_{\mu\nu}(x) = 0$, então pela expressão (2.35) temos que,

$$\partial_\lambda g_{\mu\nu} - \Gamma_{\lambda\mu}^\beta g_{\beta\nu} - \Gamma_{\lambda\nu}^\beta g_{\mu\beta} = 0. \quad (2.36)$$

Se a conexão afim satisfaz a equação (2.36) podemos dizer que ela é compatível com a métrica. Permutando os índices ciclicamente na equação acima para obter a expressão para a conexão afim, deste modo temos três equações:

$$\partial_\mu g_{\nu\lambda} - \Gamma_{\mu\nu}^\beta g_{\beta\lambda} - \Gamma_{\mu\lambda}^\beta g_{\nu\beta} = 0; \quad (2.37)$$

$$\partial_\nu g_{\lambda\mu} - \Gamma_{\nu\lambda}^\beta g_{\beta\mu} - \Gamma_{\nu\mu}^\beta g_{\lambda\beta} = 0, \quad (2.38)$$

fazendo (2.37)+(2.38)-(2.36) obtemos que,

$$\begin{aligned} \partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\lambda\mu} - \partial_\lambda g_{\mu\nu} &= (\Gamma_{\mu\nu}^\beta + \Gamma_{\nu\mu}^\beta) g_{\beta\lambda} + \\ &+ (\Gamma_{\lambda\mu}^\beta - \Gamma_{\mu\lambda}^\beta) g_{\beta\nu} + (\Gamma_{\lambda\nu}^\beta - \Gamma_{\nu\lambda}^\beta) g_{\beta\mu} = 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

então, conseguimos uma expressão para a conexão afim compatível com a métrica

$$\Gamma_{\mu\nu}^\beta = \left\{ \begin{smallmatrix} \beta \\ \mu\nu \end{smallmatrix} \right\} + K_{\mu\nu}^\beta, \quad (2.40)$$

onde o primeiro termo da soma são os bem conhecidos símbolos de Christoffel, que são expressos como

$$\left\{ \begin{smallmatrix} \beta \\ \mu\nu \end{smallmatrix} \right\} = \frac{1}{2} g^{\beta\lambda} (\partial_\mu g_{\nu\lambda} + \partial_\nu g_{\lambda\mu} - \partial_\lambda g_{\mu\nu}), \quad (2.41)$$

e o segundo termo é o tensor de contorção:

$$K_{\mu\nu}^\beta = \frac{1}{2} (T_{\mu\nu}^\beta - T_{\mu}^\beta{}_\nu - T_{\nu}^\beta{}_\mu). \quad (2.42)$$

Aqui temos uma assimetria nos dois primeiros índices, ou seja, $K_{\beta\mu\nu} = -K_{\mu\beta\nu}$ [38]. O tensor de contorção é dado em termos da parte antissimétrica da conexão afim, o tensor de torção

$$T_{\mu\nu}^\beta \equiv 2\Gamma_{[\lambda\mu]}^\beta = \Gamma_{\lambda\mu}^\beta - \Gamma_{\mu\lambda}^\beta. \quad (2.43)$$

O tensor torção é antissimétrico nos dois últimos índices. Note que os símbolos de Christoffel (2.41) são um caso particular da conexão afim. De fato, se a conexão afim não apresentar uma parte antissimétrica será igual a (2.41). Os símbolos de Christoffel são as conexões afim mais simples de serem obtidas, e tem grande importância pois depende somente da métrica. Se o espaço-tempo for plano, a métrica e a expressão (2.41) só depende da escolha das coordenadas. Realmente, podemos fazer uma escolha de tal forma que os símbolos de Christoffel desapareçam. Ao contrário de (2.41), o tensor de

contorção não desaparece com uma mudança de coordenada pois depende da assimetria da conexão. A introdução do tensor de contorção nos mostra que a descrição geométrica não é totalmente descrito pela métrica, e temos uma característica absolutamente independente que é a torção.

Agora, tomando o comutador $[\nabla_\alpha, \nabla_\beta]$ e aplicando num campo vetorial A^λ no espaço-tempo com torção teremos

$$[\nabla_\alpha, \nabla_\beta] A^\lambda = T^\tau_{\alpha\beta} \nabla_\tau A^\lambda + R^\lambda_{\tau\alpha\beta} A^\tau, \quad (2.44)$$

onde $R^\lambda_{\tau\alpha\beta}$ é o tensor de curvatura no espaço com torção. Expressaremos o tensor de curvatura como

$$R^\lambda_{\tau\alpha\beta} = \partial_\alpha \Gamma^\lambda_{\tau\beta} - \partial_\beta \Gamma^\lambda_{\tau\alpha} + \Gamma^\lambda_{\gamma\alpha} \Gamma^\gamma_{\tau\beta} - \Gamma^\lambda_{\gamma\beta} \Gamma^\gamma_{\tau\alpha}. \quad (2.45)$$

O tensor de curvatura é antissimétrico nos seus dois últimos índices $R^\mu_{\nu\alpha\beta} = -R^\mu_{\nu\beta\alpha}$. Vamos agora dividir o tensor de torção em três componentes irreduzíveis:

1. Vetor Traço: $T_\beta = T^\alpha_{\beta\alpha}$;
2. Vetor Axial: $S^\nu = \epsilon^{\alpha\beta\mu\nu} T_{\alpha\beta\mu}$;
3. Tensor: $q^\alpha_{\beta\gamma}$, satisfazendo duas condições:

- $q^\alpha_{\beta\alpha} = 0$;
- $\epsilon^{\alpha\beta\mu\nu} q_{\alpha\beta\mu} = 0$.

aqui o $\epsilon^{\alpha\beta\mu\nu}$ é o tensor de Levi-Civita. Reescrevendo a expressão (2.43) em termos das três componentes acima temos:

$$T_{\alpha\beta\mu} = \frac{1}{3}(T_\beta g_{\alpha\mu} - T_\mu g_{\alpha\beta}) - \frac{1}{6}\epsilon_{\alpha\beta\mu\nu} S^\nu + q_{\alpha\beta\mu}. \quad (2.46)$$

2.2.2 Referenciais Locais

Vamos agora introduzir um formalismo diferente para o espaço-tempo com torção e curvatura. Na seção anterior utilizamos a escolha natural para a base para o espaço tangente T_p num ponto p , onde tomamos as derivadas parciais em relação a cada coordenada naquele ponto $\hat{e}_{(\mu)} = \partial_\mu$, e o espaço cotangente T_p^* é dado pelo o gradiente das

funções coordenadas $\hat{\theta}^{(\mu)} = dx^\mu$. Entretanto, não há nada que nos impeça de escolher uma base qualquer que desejarmos. Então vamos considerar que em cada ponto da variedade introduzimos um conjunto de vetores da base, de modo que consideramos estes vetores ortonormais levando em conta o que é apropriado para a assinatura da variedade. Como consideramos o espaço-tempo, o produto interno dos nosso vetores da base será

$$g(\hat{e}_{(a)}, \hat{e}_{(b)}) = \eta_{ab}. \quad (2.47)$$

Na equação acima $g(,)$ é o tensor métrico usual e η_{ab} representa a métrica de Minkowski no espaço-tempo lorentziano. Os índices latinos representam a base que não está relacionada a um sistema de coordenadas qualquer. A partir desse ponto, podemos escrever qualquer vetor como combinação linear dos vetores da base, até mesmo a nossa antiga base $\hat{e}_{(\mu)} = \partial_\mu$,

$$\hat{e}_{(\mu)} = e^a_\mu \hat{e}_{(a)}. \quad (2.48)$$

Estes componentes e^a_μ formam uma matriz $n \times n$ e são conhecidos como tetradas ou *vielbein*. Podemos obter a sua inversa através da relação:

$$e^\mu_a e^a_\nu = \delta^\mu_\nu; \quad e^a_\mu e^\mu_b = \delta^a_b, \quad (2.49)$$

deste modo podemos escrever a base ortonormal não-coordenada em termos da base antiga:

$$\hat{e}_{(a)} = e^\mu_a \hat{e}_{(\mu)}. \quad (2.50)$$

Podemos reescrever a equação(2.47) em termos das inversas das tetradas:

$$g_{\mu\nu} e^\mu_a e^\nu_b = \eta_{ab}, \quad (2.51)$$

ou, de maneira similar, utilizando as tetradas temos,

$$g_{\mu\nu} = e^a_\mu e^b_\nu \eta_{ab}. \quad (2.52)$$

Analogamente, podemos definir uma base ortonormal não-coordenadas no espaço cotangente T_p^* . De fato, esta base se relaciona com a base do espaço tangente T_p através da relação,

$$\hat{\theta}^{(a)}(\hat{e}_{(b)}) = \delta^a_b. \quad (2.53)$$

Novamente podemos relacionar a base não-coordenada 1-forma com a base antiga $\hat{\theta}^{(\mu)} = dx^\mu$ através de:

$$\hat{\theta}^{(\mu)} = e^\mu_a \hat{\theta}^{(a)}; \quad \hat{\theta}^{(a)} = e^a_\mu \hat{\theta}^{(\mu)}. \quad (2.54)$$

Desta forma podemos escrever vetores e tensores, antes escritos na base antiga, em termos da base não-coordenada, e vice-versa:

$$T^\mu_\nu = e^\mu_a e^b_\nu T^a_b; \quad T^a_b = e^a_\mu e^\nu_b T^\mu_\nu. \quad (2.55)$$

Pela a equação (2.51) vemos que as componentes do tensor métrico na base ortonormal não-coordenada nada mais é do que a própria métrica de Minkowski. O que nos faz denotar índices latino para o espaço-tempo plano e índices gregos ao espaço-tempo curvo. Podemos mudar a base não-coordenada independentemente das coordenadas, tendo como única restrição que a condição de ortonormalidade (2.47) seja preservada. Para preservarmos a métrica plana de Lorentz podemos nos utilizar das transformações de Lorentz [40],

$$\hat{e}_{(a)} \rightarrow \hat{e}_{(a')} = \Lambda_{a'}^a(x) \hat{e}_{(a)}. \quad (2.56)$$

as matrizes $\Lambda_{a'}^a$ são transformações que dependem da posição e que não alteram a forma canônica da métrica:

$$\Lambda_{a'}^a(x) \Lambda_{b'}^b(x) \eta_{a'b'} = \eta_{ab}. \quad (2.57)$$

Então, note que temos dois tipos de transformações: As transformações de Lorentz locais representada pelas matrizes $\Lambda_{a'}^a$, e as transformações de coordenadas geral. Podemos escrever ambas transformações e obter um tensor misto,

$$T^{a'\mu'}_{b'\nu'} = \Lambda_{a'}^a \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^\mu} \Lambda_{b'}^b \frac{\partial x^\nu}{\partial x^{\nu'}} T^{a\mu}_{b\nu}. \quad (2.58)$$

Pela lei de transformação, podemos definir a derivada covariante para uma base não-coordenada. Anteriormente, a derivada covariante foi dada pela a derivada parcial mais um termo de correção como na equação (2.35). Para a base não-coordenada $\hat{\theta}^a$ vamos fazer o mesmo procedimento, a diferença é que substituiremos a conexão afim $\Gamma^\lambda_{\mu\nu}$ pela conexão 1-forma $\omega^a_b = \omega^a_\mu{}^b dx^\mu$, conhecida como conexão de spin. As componentes da conexão 1-forma são definidas como:

$$\nabla_\mu \hat{\theta}^a = \omega_\mu{}^a{}_b \hat{\theta}^b, \quad (2.59)$$

e podemos escrever a derivada covariante como,

$$\nabla_\mu X^a_b = \partial_\mu X^a_b + \omega_\mu^a{}_c X^c_b - \omega_\mu^c{}_b X^a_c. \quad (2.60)$$

Através da comparação da derivada covariante de um vetor na base das coordenadas, com a derivada covariante do mesmo vetor na base mista convertendo para a base das coordenadas, podemos encontrar as componentes da conexão 1-forma em termos das tetradas e da conexão afim,

$$\omega_\mu^a{}_b = e^a{}_\nu e^\lambda{}_b \Gamma^\nu_{\mu\lambda} - e^\lambda{}_b \partial_\mu e^a{}_\lambda. \quad (2.61)$$

Uma aplicação muito útil deste formalismo apresentado é quando temos o espaço-tempo na presença de torção. A expressão acima é muito útil quando temos o espaço-tempo sem torção, pois a conexão afim se reduz apenas aos símbolos de Christoffel (2.41). Através das expressões para o tensor de curvatura e para o tensor de torção nesse formalismo, que são conhecidas como as estruturas de Maurer-Cartan, podemos encontrar as conexões 1-forma no espaço-tempo com torção. As estruturas de Maurer-Cartan [37, 39, 40] são definidas como:

$$T^a = d\hat{\theta}^a + \omega^a{}_b \wedge \hat{\theta}^b; \quad (2.62)$$

$$R^a{}_b = d\omega^a{}_b + \omega^a{}_c \wedge \omega^c{}_b. \quad (2.63)$$

O tensor T^a nada mais é do que o próprio tensor de torção 2-forma $T^a = T^a_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu$. O operador d é a derivada exterior e o símbolo $\wedge$ representa o produto *wedge* [41], que é o produto entre formas diferenciais. Podemos também nesse formalismo, assim como feito anteriormente (2.42), relacionar o tensor de torção com tensor de contorção [42]

$$T^a = K^a{}_b \wedge \hat{\theta}^b, \quad (2.64)$$

temos aqui o tensor 2-forma relacionado a uma conexão 1-forma $K^a{}_b = K^a{}_{\mu b} dx^\mu$. Por sua vez, esta conexão 1-forma se relaciona ao tensor de contorção na forma,

$$K_{\mu ab} = K_{\beta\mu\nu} \left[e^\nu{}_a(x) e^\beta{}_b(x) - e^\nu{}_b(x) e^\beta{}_a(x) \right]. \quad (2.65)$$

Logo após de mostrar o formalismo matemático necessário para o estudo do espaço-tempo curvo na presença de torção e curvatura, vamos na próxima seção relacionar os tipos de defeitos em cristais e relacioná-los com a curvatura e a torção do espaço-tempo.

2.2.3 Tipos de Defeitos em Cristais

Após a apresentação do formalismo que descreve o espaço-tempo na presença com torção e curvatura, vamos relaciona-los com os defeitos que normalmente aparecem em cristais. Como mostrado na seção 2.2.1 podemos fazer uma aproximação linear de modo que possamos descrever uma rede cristalina para pequenas deformações através de um tensor métrico na geometria diferencial. Em [6] Katanev e Volovich formulam uma teoria de modo que relacionamos defeitos topológicos com aspectos na geometria diferencial num limite contínuo. Temos que os aspectos aos quais os defeitos topológicos estão relacionados são: As deslocções que estão relacionadas com a torção no espaço-tempo, tendo como fonte o momento angular de spin, enquanto as desclinações estão relacionados com a curvatura do espaço-tempo, tendo como fonte o tensor de energia-momento. Para encontrarmos um tensor métrico que descreva o espaço-tempo, com torção, curvatura ou ambos, onde este tensor métrico satisfaz as equações (2.26) e (2.27) Katanaev e Volovich estabeleceram quatro hipóteses para resolver as equações de Einstein:

- Soluções descrevendo meios sem defeitos, temos $R^\rho_{\lambda\mu\nu} = 0$ e $T^\rho_{\mu\nu} = 0$;
- Soluções descrevendo meios com deslocções, temos $R^\rho_{\lambda\mu\nu} = 0$ e $T^\rho_{\mu\nu} \neq 0$;
- Soluções descrevendo meios com desclinações, temos $R^\rho_{\lambda\mu\nu} \neq 0$ e $T^\rho_{\mu\nu} = 0$;
- Soluções descrevendo meios com ambos defeitos, temos $R^\rho_{\lambda\mu\nu} \neq 0$ e $T^\rho_{\mu\nu} \neq 0$.

Neste trabalho não estamos preocupados em resolver as equações de Einstein de modo que encontremos um tensor métrico que descreva um espaço de defeitos, no momento estamos só relacionando defeitos em cristais com aspectos da geometria diferencial.

Até agora falamos sobre defeitos sem descrevê-los e nem diferenciar os tipos de defeitos existentes, então a partir de agora vamos classificá-los. Defeitos topológicos já são bem conhecidos em matéria condensada. De fato, estes defeitos em cristais são obtidos através dos processos de Volterra. Processos de Volterra nada mais é do que processos de "cortar e colar" cristais ideais para descrever defeitos. A classificação dos defeitos esta relacionada as simetrias de um cristal, deslocção com a simetria de translação e a desclinação é relacionada com a simetria de rotação.

I. Deslocações

Considerando um cristal perfeito que se encontra no seu estado fundamental, e a partir dos processos de Volterra ('cortar' e 'colar' este cristal) vamos definir o conceito de deslocação. Imagine agora que cortamos esse cristal perfeito ao longo de uma superfície suave qualquer e tendo a curva como sua fronteira. Movendo arbitrariamente ambos os lados após o corte, ou adicionando ou extraindo material, para novamente colar as superfícies cortadas. Ao colar as superfícies, o cristal voltará ao normal exceto a linha lateral marcando a superfície dentro do cristal. Esta linha é conhecida como o núcleo do defeito. Logo abaixo temos um exemplo de deslocação na figura 2.6.

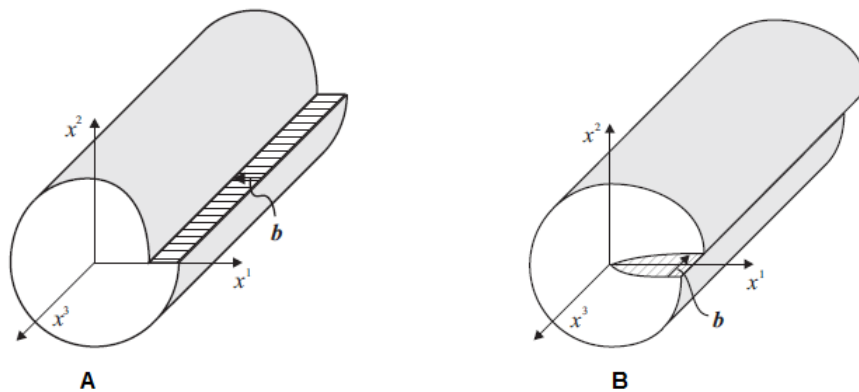


Figura 2.6: Defeito linear: Deslocação. **A.** Na figura temos uma deslocação do tipo edge com o vetor de Burgers perpendicular a linha de corte. **B.** Na figura temos uma deslocação do tipo scroll com vetor de Burgers paralelo a linha de corte [37].

Como mostrado na figura (2.6), há dois tipos de deslocações: tipo edge e tipo scroll. Considerando um corpo com simetria cilíndrica como mostrado na figura acima. Imagina agora que cortamos esse corpo ao longo do plano $x^2 = 0$ e $x^1 > 0$. Então, tomando a parte superior do corpo ($x^1 > 0$ e $x^2 > 0$) e deslocando em relação a linha de deslocação por um vetor $\vec{b}$, chamado de vetor de Burgers, e colando novamente temos uma deslocação como mostrado na figura acima. Se o vetor de Burgers for perpendicular a linha de deslocação temos uma deslocação do tipo edge, como mostrado na figura a esquerda. Se o vetor de Burgers for paralelo a linha de deslocação temos uma deslocação do tipo scroll, como mostrado na figura a direita. Podemos ainda inserir ou retirar algum material entre os

planos cortados, este caso também será uma deslocação edge.

II. Desclinações

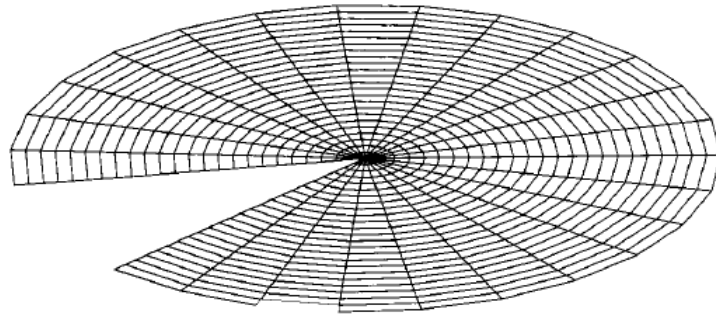


Figura 2.7: Defeito linear: Desclinação [43].

A curvatura não-nula também apresenta outro defeito já bem conhecido, a desclinação. A desclinação está relacionada à simetria de rotação de um cristal, e também, assim como ocorre com as deslocações, há dois tipos de desclinações: as desclinações positivas e as desclinações negativas. Imagine agora um plano, se retirarmos material deste plano, de modo que este material forma um cone, ao indentificar os cortes, temos uma desclinação positiva. Este ângulo retirado é conhecido como ângulo de déficit. Se em vez de retirar, nós adicionamos um certo ângulo desse material, nosso defeito será uma desclinação negativa. O ângulo acrescentado é conhecido como ângulo de acréscimo. Na figura (2.7) temos um exemplo de desclinação.

III. Despirações

São defeitos associados com ambas as simetrias de um cristal, rotação e translação. De fato, podemos retirar um certo ângulo de um material e antes de identificar os lados cortados, deslocamos um dos lados, de modo que temos uma despiração.

Neste capítulo falamos sobre o nosso objeto de estudo, o grafeno. Como o grafeno é um cristal bidimensional, introduzimos a teoria de defeitos em cristais. O nosso objetivo é

mostrar como um grafeno na presença de deslocação apresenta uma fase de Berry devido a sua própria geometria. No próximo capítulo introduziremos o conceito de fases de Berry.

Capítulo 3

Fases de Berry

Neste capítulo vamos mostrar que para uma partícula circundando um defeito através de um processo adiabático há o surgimento de uma fase, devido a geometria do sistema, e que ela obedece a uma transformação de *gauge*. Mostramos que o efeito Aharonov-Bohm é um exemplo de fase geométrica.

Seja H um operador hamiltoniano que descreve um sistema, no qual o mesmo se encontra no seu estado fundamental. Ao alterar este sistema lentamente, de modo que obedeça ao teorema adiabático [50], se o hamiltoniano H retornar a sua forma original, em consequência, seu sistema retorna ao seu estado original adicionando um fator de fase através de uma evolução cíclica. Uma evolução cíclica é uma evolução na qual o estado inicial está relacionado periodicamente com tempo. De fato, Berry [45, 48] mostrou que quando um sistema sofre uma evolução cíclica, devido as variações adiabáticas nos parâmetros do hamiltoniano, surge uma contribuição de uma fase, que é de origem estritamente geométrica. Este fator de fase contém uma dependência do circuito, ou seja, não depende da duração da evolução e apresenta a forma $\exp(i\gamma)$, em adição a fase similar devido a dinâmica do sistema na evolução temporal do sistema.

Temos vários exemplos de existência deste fator de fase, uma partícula com spin qualquer rotacionando lentamente em torno de um campo magnético, assim como vários outros exemplos mostrados na gravitação. Há existência deste fator de fase tanto para bósons quanto para férmions. O caso mais famoso talvez seja o efeito Aharonov-Bohm [44, 50] já muito estudado na física. A descoberta foi muito importante na física, pois desconstruiu a ideia que vigorava, na qual o vetor potencial eletromagnético $\vec{A}$ era apenas

um conveniente artifício matemático, porém dispensável, pois não seriam mensuráveis de forma direta. Foi mostrado por Aharonov e Bohm que a dinâmica de uma partícula carregada pode ser afetada pelo vetor potencial, mesmo que a partícula se mova através de uma região onde não haja campo.

Outro fator importante a ser ressaltado, é que por muito tempo este fator de fase foi ignorado na mecânica quântica pois acreditavam que a fase era arbitrária. Realmente, em mecânica quântica as medidas envolvem o módulo ao quadrado da função de onda $|\psi|^2$ de modo que o fator de fase se cancelava. A partir do efeito Aharonov-Bohm, que mostrou que podemos medir este fator de fase, de modo que ganhou importância num sistema físico. A partir daí, várias outras aplicações utilizando estas fases geométricas foram descobertas. Em particular, na matéria condensada elas representaram um papel muito importante. Fases de Bloch não-integráveis na função de onda pode ser consideradas fases geométricas. Estes fatores de fases foram relacionados com a polarização de cristais isolantes, e usadas para calcular propriedades piezoelétricas e ferroelétricas. Podem também afetar a dinâmica semiclássica de elétrons em metais. Esses fatores de fase também tem grande importância na teoria do efeito Hall anômalo. Outras aplicações inclui a dinâmica de vórtices quantizados entre outras. Neste capítulo discutiremos sobre processos adiabáticos, depois vamos chegar na expressão para a fase de Berry.

3.1 Processos Adiabáticos

Processos adiabáticos são definidos através de mudanças suaves nas condições externas do sistema. Como exemplo, imagine um pêndulo numa caixa fechada sem atrito, e nem resistência do ar, com um suporte em cima de modo que possamos mover este pêndulo. Se movermos este pêndulo de forma abrupta, sua oscilação se tornará caótica. Por outro lado ao movermos o pêndulo suavemente de modo que não haverá interferências na oscilação do pêndulo, sua amplitude continuará a mesma. Para processos adiabáticos há dois tempos envolvidos neste processo. Primeiro, temos o tempo interno T_i relacionado com o movimento do sistema em si. E segundo o tempo externo T_e relacionado com a mudança dos parâmetros externos do sistema. No pêndulo, T_i está relacionado ao tempo de oscilação do próprio pêndulo, e T_e está relacionada ao movimento da caixa na qual o

pêndulo esta dentro. Para ocorrer um processo adiabático temos que $T_e \gg T_i$. Supondo agora que um hamiltoniano mude através de um processo adiabático de H^i para um H^f . Vamos enunciar o teorema adiabático:

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

Para provar, considere uma partícula que inicialmente esta no n -ésimo auto-estado de um hamiltoniano independente do tempo, de modo que

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

a função de onda dependente do tempo é obtida simplesmente ao adicionar um fator de fase, assim temos que

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

Agora considerando que o hamiltoniano depende do tempo, temos algo similar

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

então, de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo o auto-estado evolui como,

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

para determinado instante de tempo, vamos definir uma base ortonormal,

$$\langle\psi_m(t)|\psi_n(t)\rangle = \delta_{mn}, \quad (3.5)$$

aqui δ_{mn} é o bem conhecido delta de Kronecker. A base é completa, deste modo a solução da equação de Schrödinger (3.4) é escrito através de uma combinação linear,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.6)$$

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

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (3.7)$$

Vamos substituir nossa solução (3.6) na equação de Schrödinger dependente do tempo (3.4):

$$i\hbar \sum_n \left[\dot{c}_n |\psi_n\rangle + c_n |\dot{\psi}_n\rangle + i c_n \psi_n \dot{\theta}_n \right] e^{i\theta_n} = \sum_n c_n (H|\psi_n\rangle) e^{i\theta_n}, \quad (3.8)$$

tomando as equações (3.3) e (3.7), vamos que na equação acima o último termo no lado esquerdo da equação se cancela com o lado direito. Assim, teremos a relação

$$\sum_n \dot{c}_n e^{i\theta_n} |\psi_n\rangle = - \sum_n c_n e^{i\theta_n} |\dot{\psi}_n\rangle. \quad (3.9)$$

Tomando o produto interno (3.5) através da aplicação do bra $\langle\psi_m|$ na equação acima temos,

$$\sum_n \dot{c}_n \delta_{mn} e^{i\theta_n} = - \sum_n \langle\psi_m| \dot{\psi}_n\rangle e^{i\theta_n}, \quad (3.10)$$

deste modo, teremos

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n \langle\psi_m| \dot{\psi}_n\rangle e^{i(\theta_n - \theta_m)} \quad (3.11)$$

Vamos agora deixar esta expressão de lado, porém retornaremos a ela antes do fim. No momento, derivaremos em relação ao tempo a expressão (3.3),

$$\dot{H} |\psi_n\rangle + H |\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n |\psi_n\rangle + E_n |\dot{\psi}_n\rangle. \quad (3.12)$$

Novamente, tomando o produto interno (3.5) através da aplicação do bra $\langle\psi_m|$, temos

$$\langle\psi_m| \dot{H} |\psi_n\rangle + \langle\psi_m| H |\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n \delta_{mn} + E_n \langle\psi_m| \dot{\psi}_n\rangle, \quad (3.13)$$

como o hamiltoniano H é um operador hermitiano [50], podemos utilizar a seguinte propriedade $\langle\psi_m| H = \langle\psi_m| E_m$. Quando $m \neq n$, a expressão acima se tornará

$$\langle\psi_m| \dot{H} |\psi_n\rangle = (E_n - E_m) \langle\psi_m| \dot{\psi}_n\rangle, \quad (3.14)$$

substituindo a expressão acima na equação (3.11),

$$\dot{c}_m(t) = -c_m \langle\psi_m| \dot{\psi}_m\rangle - \sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle\psi_m| \dot{H} |\psi_n\rangle}{(E_n - E_m)} e^{(-i/\hbar) \int_0^t [E_n(t') - E_m(t')] dt'}, \quad (3.15)$$

na aproximação adiabática assumimos que o tempo do movimento externo do sistema é muito maior do que o tempo de oscilação de uma partícula confinada, de modo que $\dot{H}$

é muito pequena e podemos jogar fora o segundo termo da equação acima. Podemos escrever a expressão acima como,

$$\dot{c}_m(t) = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle. \quad (3.16)$$

Esta é uma equação diferencial de 1º grau, e a sua solução é facilmente obtida

$$c_m(t) = -c_m(0)e^{i\gamma_m(t)}, \quad (3.17)$$

onde esse fator de fase é expresso como,

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \psi_m(t') | \frac{\partial}{\partial t'} \psi_m(t') \rangle dt', \quad (3.18)$$

de volta a solução (3.6), substituindo o resultado acima

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.19)$$

Se num caso particular onde $c_n(0) = 1$, e a partícula esta inicialmente no n-ésimo auto-estado, depois de um processo adiabático esta partícula continuará nesse mesmo n-ésimo auto-estado com um acréscimo de uma fase como queríamos demonstrar:

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |\psi_n(t)\rangle. \quad (3.20)$$

3.2 Fases Geométricas

Na seção anterior, mostramos que uma partícula que inicialmente estava no n-ésimo auto-estado de um certo hamiltoniano H , permanecerá neste mesmo auto-estado com um acréscimo de um fator de fase após um processo adiabático. Vamos considerar agora que a dependência temporal do auto-estado vem de algum parâmetro que muda com o tempo $\vec{R}(t)$, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_n\rangle = \frac{\partial R^i}{\partial t} \frac{\partial}{\partial R^i} |\psi_n\rangle, \quad (3.21)$$

em consequência deste fato, podemos reescrever o fator de fase (3.18)

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R^i} \rangle \frac{dR^i}{dt'} dt'; \quad (3.22)$$

$$= i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R | \psi_n \rangle \cdot d\vec{R}; \quad (3.23)$$

$$= \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \vec{\mathcal{A}}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{R}. \quad (3.24)$$

Aqui, $\vec{\mathcal{A}}_n$ é conhecido como o potencial vetor de Mead-Berry [44], e pode ser expresso como

$$\vec{\mathcal{A}}_n = i\langle\psi_n|\vec{\nabla}_R|\psi_n\rangle. \quad (3.25)$$

Estamos considerando que o vetor $\vec{R}$ é m-dimensional e o $\vec{\nabla}_R$ é o gradiente em relação a este parâmetro. Se o sistema volta ao seu estado original, ou seja, um processo cíclico numa curva fechada C , após um certo tempo T podemos escrever a fase de Berry [45] como,

$$\gamma_n(T) = i \oint_C \langle\psi_n|\vec{\nabla}_R|\psi_n\rangle \cdot d\vec{R}. \quad (3.26)$$

Note que a fase de Berry é dada por uma integral de linha em relação a um parâmetro espacial, e também que a fase independe do caminho tomado. A normalização dos auto-estado $|\psi_n\rangle$ implica que o argumento na equação (3.23) seja imaginário, garantindo assim que a fase de Berry $\gamma_n(t)$ seja real. De fato, podemos provar isto partindo do pressuposto que os auto-estado são normalizados,

$$\nabla_R\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 0, \quad (3.27)$$

de modo que podemos escrever como,

$$\langle\nabla_R\psi_n|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle^* + \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle = 0. \quad (3.28)$$

Facilmente notamos que na equação acima, que para um número somado ao seu conjugado é zero então $\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle$ tem que ser um imaginário puro, garantindo que a fase de Berry seja real. Se fizermos uma transformação de *gauge* $|\psi'\rangle = e^{i\zeta}|\psi\rangle$, onde $\zeta(R)$ é uma função bem definida do parâmetro adiabático R , a partir da definição do potencial vetor de Mead-Berry (3.25), teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n \longrightarrow \mathcal{A}'_n &= i\langle\psi'_n|\nabla_R|\psi'_n\rangle; \\ &= i\langle\psi_n|e^{-i\zeta_n(R)}\nabla_R e^{i\zeta_n(R)}|\psi_n\rangle; \\ &= i\langle\psi_n|\nabla_R|\psi_n\rangle + ie^{-i\zeta_n(R)}(\nabla_R e^{i\zeta_n(R)}); \\ &= \mathcal{A}_n(R) - \nabla_R\zeta_n(R). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Em consequência, a fase de Berry será

$$\begin{aligned} \gamma_n(t) \longrightarrow \gamma'_n(t) &= \int_{R(0)}^{R(t)} \mathcal{A}'_n(R) dR \\ &= \gamma_n(t) - \zeta_n(R(t)) + \zeta_n(R(0)) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Se a função $\zeta_n(R)$ for arbitrária, podemos então fazer uma escolha de tal modo que a fase de Berry desapareça e retornamos para o caso particular da equação (3.6),

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)}|\psi_n(t)\rangle. \quad (3.31)$$

Porém, se o caminho for fechado, e depois de um determinado tempo T os parâmetros voltarem ao seus valores iniciais, não poderemos escolher o valor de $\zeta_n(R)$ arbitrariamente de modo que a fase de Berry desapareça. Para $R(T) = R(0)$, isto implica que

$$e^{i\zeta_n(R(T))} = e^{i\zeta_n(R(0))}, \quad (3.32)$$

que por sua vez implica que o valor da função $\zeta_n(R)$ é,

$$\zeta_n(R(T)) = \zeta_n(R(0)) + 2\pi l, \quad (3.33)$$

onde l é um número inteiro. Voltando a equação (3.26), vamos ter que

$$\begin{aligned} \gamma_n(T) \longrightarrow \gamma'_n(T) &= \oint_C \mathcal{A}'_n(R) dR \\ &= \oint_C \mathcal{A}_n(R) dR - 2\pi l \\ &= \gamma_n(T) - 2\pi l \end{aligned} \quad (3.34)$$

Isto mostra que a fase de Berry é invariante sob uma transformação de *gauge*, e não pode ser removida. Da equação (3.29), vemos que o potencial vetor de Mead-Berry obedece a mesma regra de transformação de *gauge* do potencial vetor descrito no eletromagnetismo. Ao contrário da fase de Berry, o potencial de Mead-Berry (3.29) não é invariante sobre uma transformação de *gauge*. O conjunto das funções $\zeta_n(R)$ formam o grupo $U(1)$. Note que se o parâmetro for tridimensional $\vec{R} = (R_1, R_2, R_3)$, temos a analogia total com o eletromagnetismo. A versão relativística foi discutido em [46, 49, 51], baseado na equação de Dirac e garantindo que a fase de Berry satisfaz a invariância de Lorentz na teoria quântica relativística.

3.3 Efeito Aharonov-Bohm

Um dos principais exemplos de fase geométricas, como apontado por Berry [45, 48], é o efeito Aharonov-Bohm [44, 50]. Este efeito foi um experimento proposto, por

Aharonov-Bohm, onde um feixe de elétrons é dividido em dois e passa pelos lados de um solenóide muito longo por onde passa uma corrente elétrica I , de modo que o campo magnético seja constante dentro do solenóide, entretanto fora do solenóide o campo magnético é nulo $\vec{B} = 0$, ver Fig. 3.1. Após este processo, os dois feixes são recombinados, porém há uma diferença de fase entre esses dois feixes.

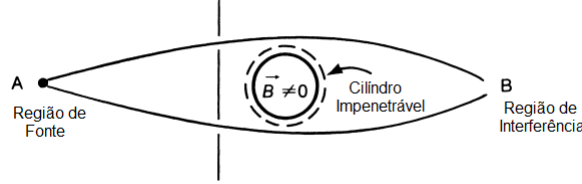


Figura 3.1: Representação do efeito Aharonov-Bohm [52].

Entretanto, apesar do campo magnético ser nulo fora do solenóide, seu potencial vetor não é. De fato, pela condição de *gauge* $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, temos que

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi}; \quad \text{para } r > a, \quad (3.35)$$

aqui a é o raio do solenóide, e $\Phi = \pi a^2 B$ é o fluxo magnético. Vamos mostrar agora como este efeito pode ser interpretado como uma fase geométrica. Vamos considerar um sistema quântico onde uma partícula está confinada numa caixa de potencial infinito, com o centro da caixa é dado pelo o vetor $\vec{R}$, onde movemos esta caixa em torno da linha de fluxo (ver Fig. 3.2).

A equação de Schrödinger independente do tempo para este caso é,

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 + V(\vec{r} - \vec{R}) \right] |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle. \quad (3.36)$$

O hamiltoniano da partícula depende do momento conjugado e da posição, e a função de onda tem a forma $\psi_n(\vec{r} - \vec{R}) = \langle \vec{r} | \psi_n(\vec{R}) \rangle$ com energias E_n , independente de $\vec{R}$. A solução pra equação de Schrödinger pode ser dada multiplicando ψ_n por um fator de fase de Dirac apropriado [47]. O fator de fase de Dirac nada mais é do que a soluções das equações de transformação de *gauge* da eletrodinâmica. De modo que temos,

$$\langle \vec{r} | \psi_n(\vec{R}) \rangle = \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}) d\vec{r} \right] \psi_n(\vec{r} - \vec{R}). \quad (3.37)$$

Transportando a caixa em torno da linha de fluxo por um caminho fechado, através de um processo adiabático, e utilizando as equações (3.26) e (3.37), podemos calcular a fase de Berry,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle &= \iiint d^3r \psi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \left[-\frac{iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) + \nabla_R \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right] \\
 &= \iiint d^3r \psi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \left[-\frac{iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) - \nabla \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right] \\
 &= -\frac{iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}).
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

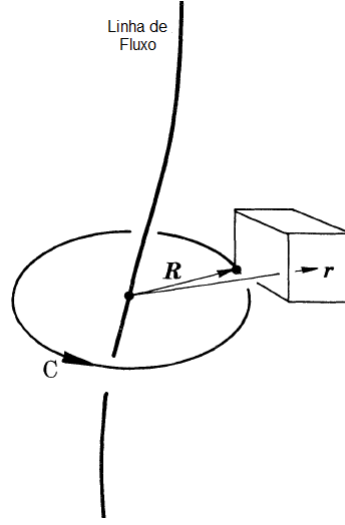


Figura 3.2: Efeito Aharonov-Bohm considerando uma caixa de potencial circundando uma linha de fluxo [45].

Levando em conta que $\nabla_R = -\nabla$, onde o operador ∇ é o gradiente em relação a coordenada $\vec{r}$. Nas integrais acima, o segundo termo é $i/\hbar$ vezes o valor esperado do momento $\langle p \rangle = 0$. Para operadores hamiltonianos nos quais o valor esperado da posição é uma constante, o valor esperado do momento é nulo [50]. Substituindo em (3.26),

$$\begin{aligned}
 \gamma(T) &= \frac{q}{\hbar} \oint \vec{A}(\vec{R}) \cdot d\vec{r} \\
 &= \frac{q}{\hbar} \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{a} \\
 &= \frac{q\Phi}{\hbar}.
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Este resultado confirma que o efeito Aharonov-Bohm é um exemplo de fase geométrica. Vemos também, que a fase independe do número quântico n . Este fator de fase pode ser observado através de experimentos de interferência entre partículas na caixa transportada e naquelas partículas que estão confinadas mas não são transportadas.

3.4 Acoplamento F rmion-Tor  o

Nesta se  o mostraremos o aparecimento de uma importante fase geom trica no grafeno obtida por Mesaros *et al.* em [5], fase na qual nos inspirou neste trabalho. Neste trabalho, Mesaros *et al.* utiliza a m trica dada em [37] para descrever o grafeno na presen a de desloca  o do tipo edge. Por simplicidade,   considerado que a taxa de Poisson $\sigma = 0$ e que o vetor de Burgers est  ao longo do eixo x . Deste modo, a base ortonormal $\hat{\theta}^a = e^a_\mu dx^\mu$ neste espa o   dado por

$$\begin{pmatrix} \hat{\theta}^1 \\ \hat{\theta}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{b}{2\pi r} \sin \phi & \frac{b}{2\pi r} \cos \phi \\ \frac{b}{2\pi r} \cos \phi & 1 - \frac{b}{2\pi r} \sin \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ r d\phi \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Se a base ortonormal acima for rotacionada para $\{\hat{\theta}^x, \hat{\theta}^y\}$, a a  o topol gica da desloca  o nos el trons de Dirac devem ser vistos como uma fase de Barry, de modo que teremos

$$\begin{aligned} i\gamma^a e^\mu_a(x) \partial_\mu \Psi &= i\gamma^a (\delta^\mu_a + X^\mu_a) \partial_\mu \Psi; \\ &= i\gamma^\nu \partial_\nu \left[\exp \left(\int dx^\alpha X^\mu_\alpha \partial_\mu \right) \right] \Psi = 0, \end{aligned} \quad (3.41)$$

Aqui $X^\mu_a(b) = X^\mu_a(-b)$   a perturba  o proporcional ao vetor de Burgers. Esta holonomia n o trivial   a respons vel pelo o longo alcance da influ ncia do defeito no cristal, tomando

$$H(\vec{b}) = e^{(\oint dx^\nu X^\mu_\nu) \partial_\mu} = e^{i\vec{b} \cdot (-i\vec{\nabla})}. \quad (3.42)$$

A transla  o de um vetor da rede   equivalente a multiplica  o por um correspondente fator de fase $\exp(i\vec{K} \cdot \vec{b})$. Deste modo a verdadeira holonomia   dada substituindo o gerador de transla  o continua $i\vec{\nabla}$ pelo gerador de transla  o da rede $\vec{K}\tau_3$, temos que,

$$H_{lattice}(\vec{b}) = e^{i\vec{b} \cdot \vec{K}\tau_3}. \quad (3.43)$$

At  agora, apresentamos todos os elementos necess rios para o estudo de desloca  es no grafeno. No pr ximo cap tulo vamos estudar uma folha de grafeno na presen a de desloca  es, de modo que devido a estes defeitos teremos o aparecimento de fases de Berry no grafeno.

Capítulo 4

Fases Geométricas em Grafeno na Presença de Deslocações

O principal trabalho realizado nessa dissertação envolve grafeno na presença de defeitos. Como dito anteriormente, o fato interessante no grafeno é que por ele ser um cristal bidimensional, então apresenta propriedades físicas excepcionais. Pela descrição de *Tight-binding* para o grafeno, vemos que o comportamento dos elétrons próximos aos pontos de Fermi obedecem a uma equação do tipo Dirac para férmions sem massa em $(2+1)$ dimensões. De modo que, elétrons interagindo com o potencial da rede que vivem um mundo de baixas energias, apresentam comportamentos e efeitos que lembram os férmions de Dirac relativísticos. De fato, nessa aproximação, o espectro de energia é linear em relação ao momento.

Outro fato importante é que o grafeno imita alguns aspectos da estrutura gravitacional. Da teoria geométrica de defeitos, temos que torção e curvatura se relacionam respectivamente com deslocação e desclinação, defeitos topológicos presentes em cristais. De modo que se torna interessante estudar a influência desses defeitos nas propriedades físicas do grafeno. Uma deslocação do tipo edge no grafeno tem sido encontrado na forma de um par pentágono-heptágono em sua estrutura. Recentemente Mesaros *et al.* [5] investigaram o aparecimento de fases de Berry em grafeno na presença de deslocações. Neste artigo, foi constatado o aparecimento de uma fase geométrica não-abeliana obtida devida a uma mudança no referencial local.

Neste capítulo mostraremos que para uma quasipartícula no grafeno considerando

a presença de uma deslocação do tipo edge, vai ocorrer o surgimento de duas fases de Berry. A primeira fase ocorre devido a introdução de um acoplamento não-mínimo com a torção de modo que vai aparecer uma fase geométrica abeliana. A segunda fase, é a mesma fase não-abeliana encontrada em [5], devido a mudança do referencial local. Na seção 4.1 deste capítulo utilizaremos uma métrica que descreve o grafeno com uma deslocação do tipo edge com vetor de Burgers na direção radial, e na seção seguinte a deslocação do tipo edge terá o vetor de Burgers na direção x .

4.1 Deslocação do Tipo Edge com Vetor de Burgers na Direção Radial

Nesta seção, vamos considerar o grafeno na presença de uma deslocação do tipo edge, onde o vetor de Burgers esta na direção radial. Como dito no Capítulo 1 desta dissertação, utilizando a teoria geométrica de defeitos podemos descrever um cristal através de geometria diferencial, assim como feito na gravitação. Onde defeitos em cristais imitam efeitos de torção e curvatura no espaço-tempo curvo. Queremos saber o efeito da deslocação num sistema, no caso o grafeno, que obedece uma equação do tipo Dirac sem massa e apresenta uma dispersão linear.

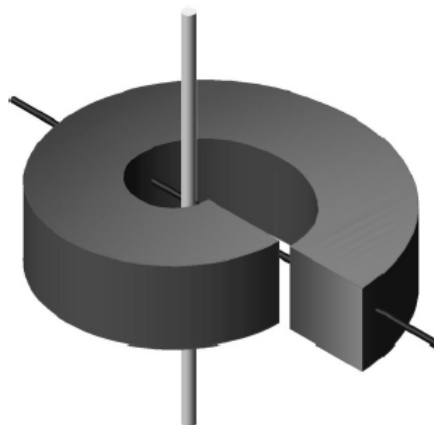


Figura 4.1: Deslocação do tipo Edge com vetor de Burgers na direção radial [57].

Não estamos preocupados em encontrar uma métrica que corresponda a este sis-

tema. Assim, vamos começar a partir de uma métrica já demonstrada na literatura [53] e descrita pela Fig. 4.1 abaixo, desconsiderando a direção z pois o grafeno é um material estritamente bidimensional. O elemento de linha que descreve esse sistema, considerando $\hbar = c = 1$, é dado na forma:

$$ds^2 = -dt^2 + d\rho^2 + 2\chi d\rho d\varphi + (\chi^2 + \rho^2) d\varphi^2 \quad (4.1)$$

Aqui o parâmetro χ é constante e relaciona a métrica com a distorção do defeito, onde sua relação com o vetor de Burgers é dada por $\chi = |\vec{b}|/2\pi$. O tensor métrico relacionado com este elemento de linha é descrito por,

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \chi \\ 0 & \chi & (\chi^2 + \rho^2) \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

O determinante do tensor métrico é $g = \det(g_{\mu\nu}) = -\rho^2$. Sabemos a quasipartícula no grafeno próxima aos pontos de Fermi se comporta relativisticamente. De modo que para estudar a influência da deslocação na dinâmica relativística devemos construir um referencial local de modo que podemos definir os spinores tendo o pano de fundo o espaço-tempo curvo [54, 55]. Vamos construir um referencial local através de uma base não-coordenada $\hat{\theta}^a = e^a_\mu(x)dx^\mu$,

$$\begin{aligned} \hat{\theta}^0 &= dt; \\ \hat{\theta}^1 &= d\rho + \chi d\varphi; \\ \hat{\theta}^2 &= \rho d\varphi. \end{aligned} \quad (4.3)$$

As componentes $e^a_\mu(x)$ num sistema (2+1)-dimensional são chamadas de tríades e devem satisfazer a relação $g_{\mu\nu} = e^a_\mu(x)e^b_\nu(x)\eta_{ab}$, onde η_{ab} é o tensor de Minkowski. Podemos ainda definir uma inversa da tríade através de $dx^\mu = e^\mu_a(x)\hat{\theta}^a$, onde $e^a_\mu(x)e^\mu_b(x) = \delta^a_b$ e $e^\mu_a(x)e^a_\nu(x) = \delta^\mu_\nu$. Através das equações (4.3) podemos escrever as tríades como,

$$e^a_\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \chi \\ 0 & 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad e^\mu_a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{\chi}{\rho} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Para encontrar a contribuição da torção e a conexão 1-forma, devemos resolver as estruturas de Maurer-Cartan. As equações de Maurer-Cartan são dadas pela expressão

$T^a = d\hat{\theta}^a + \omega^a_b \wedge \hat{\theta}^b$, onde $T^a = T^a_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu$ é a torção 2-forma e $\omega^a_b = \omega^a_b(x) dx^\mu$ é a conexão 1-forma [41]. Devido a construção do referencial local (4.4) temos que a torção é no plano, e torna-se imperioso dizer que a componente $T^0 = 0$. Como consequência disto temos que todas as componentes da conexão 1-forma relacionados com T^0 devem ser nulas,

$$\begin{aligned} T^0 &= d\hat{\theta}^0 + \omega^0_b \wedge \hat{\theta}^b; \\ &= d(dt) + \omega^0_b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu; \\ &= \omega^0_b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu = 0, \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nas equações acima utilizamos uma propriedade da derivação exterior que diz $d(dt) = d(1 \cdot dt) = d1 \wedge dt = 0 \wedge dt = 0$ [41]. Isto implica que, considerando que a conexão 1-forma é antissimétrica nos dois últimos índices,

$$\omega^0_b = \omega^b_0 = 0. \quad (4.6)$$

Note também que, mais uma vez devido a escolha de um referencial local (4.4), não temos torção no eixo 2, sendo assim a componente $T^2 = 0$. Da equação acima temos que as componentes da conexão 1-forma $\omega^0_2 = \omega^2_0$ são nulas. Pelas a expressão das estruturas de Maurer- Cartan, temos que

$$\begin{aligned} T^2 &= d\hat{\theta}^2 + \omega^2_b \wedge \hat{\theta}^b; \\ &= d\hat{\theta}^2 + \omega^2_b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu = 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Pela definição de derivada exterior [41], vamos tomar a derivada exterior de $\hat{\theta}^2$ é,

$$\begin{aligned} d\hat{\theta}^2 &= d(e^2_\varphi d\varphi) \\ &= \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (e^2_\varphi) dx^\alpha \wedge d\varphi; \\ &= \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho) d\rho \wedge d\varphi \\ &= d\rho \wedge d\varphi. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Para a equação (4.7) ser nula, temos que a única componente da conexão 1-forma

não nula é a $\omega_\varphi^2{}_1$.

$$\begin{aligned}
d\rho \wedge d\varphi + \omega_\mu^2{}_b dx^\mu \wedge e^b{}_\nu dx^\nu &= 0; \\
d\rho \wedge d\varphi + \omega_\mu^2{}_1 dx^\mu \wedge e^1{}_\nu dx^\nu &= 0; \\
d\rho \wedge d\varphi + \omega_\mu^2{}_1 dx^\mu \wedge e^1{}_\rho d\rho &= 0; \\
d\rho \wedge d\varphi + \omega_\varphi^2{}_1 d\varphi \wedge d\rho &= 0; \\
d\rho \wedge d\varphi - \omega_\varphi^2{}_1 d\rho \wedge d\varphi &= 0.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

De fato, para a equação acima ser verdade é imperioso que todas as outras componentes sejam nulas. Note que o segundo termo da equação acima tem que ser proporcional a $d\rho \wedge d\varphi$, e a única componente que obedece a este requisito é $\omega_\varphi^2{}_1$. Deste modo, a componente $\omega_\varphi^2{}_1$ é,

$$\omega_\varphi^2{}_1 = -\omega_\varphi^1{}_2 = 1. \tag{4.10}$$

A única componente da torção 2-forma não-nulo é o T^1 . Vamos descrever a equação de Maurer-Cartan para a componente T^1 :

$$\begin{aligned}
T^1 &= d\hat{\theta}^1 + \omega^1{}_b \wedge \hat{\theta}^b \\
&= d\hat{\theta}^1 + \omega_\mu^1{}_b dx^\mu \wedge e^b{}_\nu dx^\nu
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Como dito anteriormente as únicas componentes da conexão 1-forma não-nulas estão em (4.10). Em consequência disto, substituiremos a componente $\omega_\varphi^1{}_2$ no segundo termo da equação acima. Assim este segundo termo desaparece devido a propriedades de formas diferenciais¹. Então teremos que,

$$\begin{aligned}
T^1 &= d(e^1{}_\mu dx^\mu) = d(d\rho + \chi d\varphi); \\
&= d(d\rho) + \chi d(d\varphi); \\
&= \chi d^2\varphi
\end{aligned} \tag{4.12}$$

¹Regras governando a álgebra de formas diferenciais. Considere η e ω formas diferenciais:

- Distributiva: $(\omega_1 + \omega_2) \wedge \eta = \omega_1 \wedge \eta + \omega_2 \wedge \eta$, $\omega \wedge (\eta_1 + \eta_2) = \omega \wedge \eta_1 + \omega \wedge \eta_2$;
- Associativa: $(f\omega) \wedge \eta = \omega \wedge (f\eta) = f(\omega \wedge \eta)$, onde f é uma função qualquer;
- Antissimétrica: $\eta \wedge \omega = -\omega \wedge \eta$;
- $dx^\mu \wedge dx^\nu = 0$, se $\mu = \nu$.

A coordenada φ se relaciona com as coordenadas cartesianas através de $\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$. A diferencial $d\varphi$ não é exata, devido ao fato que na origem a $d^2\varphi \equiv d^2\arctg\left(\frac{y}{x}\right) = 2\pi\delta(\rho)\delta(\varphi)d\rho \wedge d\varphi$ é indeterminada. Aqui $\delta(x)$ é a distribuição de Dirac. De modo que podemos escrever a componente da torção 2-forma como:

$$T^1 = 2\pi\chi\delta(\rho)\delta(\varphi)d\rho \wedge d\varphi. \quad (4.13)$$

Podemos relacionar a torção 2-forma com o tensor de torção através de $T^a = \frac{1}{2}T^a_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu$. Assim, teremos

$$\begin{aligned} T^1 &= \frac{1}{2}T^1_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu; \\ &= \frac{1}{2}e^1_\alpha T^\alpha_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu; \\ &= \frac{1}{2}(e^1_\rho T^\rho_{\mu\nu} + e^1_\varphi T^\varphi_{\mu\nu}) dx^\mu \wedge dx^\nu; \\ &= \frac{1}{2}(T^\rho_{\rho\varphi} + \chi T^\varphi_{\rho\varphi}) d\rho \wedge d\varphi + \frac{1}{2}(T^\rho_{\varphi\rho} + \chi T^\varphi_{\varphi\rho}) d\varphi \wedge d\rho. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Veja que as componentes do tensor de torção $T^\varphi_{\rho\varphi} = T^\varphi_{\varphi\rho} = 0$, pois não carregam a informação do tensor de Burgers. Em consequência disto, temos que

$$\begin{aligned} T^1 &= \frac{1}{2}(T^\rho_{\varphi\rho} - T^\rho_{\rho\varphi})d\varphi \wedge d\rho; \\ &= T^\rho_{\varphi\rho}d\varphi \wedge d\rho, \end{aligned} \quad (4.15)$$

E comparando a equação acima com (4.13), o tensor de torção será:

$$T_\varphi = T^\rho_{\varphi\rho} = -T^\rho_{\rho\varphi} = -2\pi\chi\delta(\rho)\delta(\varphi). \quad (4.16)$$

Na próxima seção, Vamos mostra o surgimento da fase geométrica relativística abeliana no estudo da dinâmica da quasipartícula na presença da deslocação descrita pelo o elemento de linha (4.1).

4.1.1 Fase Geométrica Abeliana

Para o aparacimento da fase geométrica ocorrer vamos usar a mesma aproximação utilizada por Berry para a descrição de fases geométricas, estendendo para o caso relativístico [49, 46, 51]. Usando o método de fase de Dirac [47], encontraremos a fase quântica obtida para a quasipartícula no grafeno circundando o defeito. Na presença do defeito,

torna-se conveniente escrever a equação de Dirac usando a teoria de spinor no espaço-tempo curvo [54, 55]. A derivada covariante para o espaço-tempo curvo na presença de torção é definido como [38]:

$$\tilde{\nabla}_\mu = \partial_\mu + \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}(x)\Sigma^{ab} + \frac{i}{4}K_{\mu ab}\Sigma^{ab}, \quad (4.17)$$

aqui temos que $\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}[\gamma^a, \gamma^b]$ e o termo $\Gamma_\mu = \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}(x)\Sigma^{ab}$ é conhecido na literatura como a conexão spinorial. O objeto $K_{\mu ab}(x)$ está relacionado ao tensor de torção através das equações (2.42) e (2.65). As matrizes γ^a definidas no referencial local são idênticas as matrizes de Dirac no espaço-tempo de Minkowski:

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^i = \hat{\beta}\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}; \quad \Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

onde $\vec{\Sigma}$ é o vetor de spin, e σ^i são as matrizes de Pauli, que satisfazem a relação $(\sigma^i\sigma^j + \sigma^j\sigma^i) = 2\eta^{ij}$, com $i, j, k = 1, 2, 3$. Como apontado em [38], e anteriormente no capítulo 1 desta dissertação, podemos reescrever o tensor de torção em termos de suas componentes irreduzíveis: O traço $T_\mu = T_{\mu\beta}^\beta$, o vetor axial $S^\alpha = \epsilon^{\alpha\beta\nu\mu}T_{\beta\nu\mu}$ e o tensor $q_{\beta\nu\mu}$, que satisfaz as condições $q_{\mu\beta}^\beta = 0$ e $\epsilon^{\alpha\beta\nu\mu}q_{\beta\nu\mu} = 0$. Perceba que o traço T_μ e o tensor $q_{\beta\nu\mu}$ representam a parte simétrica do tensor de torção, enquanto o vetor axial S^α representa a parte antissimétrica. De modo, que naturalmente essa parte simétrica desacopla para férmions [38]. Entretanto, vimos que para o caso da quasipartícula no grafeno na presença de deslocação, a única componente não-nula do tensor de torção é o traço que é dado pela equação (4.16). Então, para estudar a influência da deslocação na quasipartícula do grafeno devemos introduzir um acoplamento não-mínimo [38, 56],

$$i\gamma^\mu\nabla_\mu \rightarrow i\gamma^\mu\tilde{\nabla}_\mu + \nu\gamma^\mu T_\mu. \quad (4.19)$$

A derivada covariante é definida como $\tilde{\nabla}_\mu = \partial_\mu + \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}(x)\Sigma^{ab}$, e ν é um parâmetro arbitrário adimensional do acoplamento não-mínimo. Podemos então escrever a equação de Dirac para a quasipartícula do grafeno sem massa,

$$\begin{aligned} i\gamma^t\partial_t\psi + i\gamma^\rho\partial_\rho\psi + i\gamma^\varphi\left(\partial_\varphi + \frac{i}{4}\omega_{\varphi ab}\Sigma^{ab}\right)\psi + \nu\gamma^\varphi T_\varphi\psi &= 0; \\ ie^t_a\gamma^a\partial_t\psi + ie^\rho_b\gamma^b\partial_\rho\psi + ie^\varphi_c\gamma^c\left(\partial_\varphi + \frac{i}{4}\omega_{\varphi ab}\Sigma^{ab}\right)\psi + \nu e^\varphi_d\gamma^dT_\varphi\psi &= 0, \end{aligned}$$

Abrindo todas os termos relevantes dessas somas teremos,

$$\begin{aligned} ie^t_0\gamma^0\partial_t\psi + ie^\rho_1\gamma^1\partial_\rho\psi + ie^\rho_2\gamma^2\partial_\rho\psi + ie^\varphi_2\gamma^2\left(\partial_\varphi + \frac{i}{4}\omega_{\varphi 21}\Sigma^{21} + \frac{i}{4}\omega_{\varphi 12}\Sigma^{12}\right)\psi + \\ + \nu e^\varphi_2\gamma^2T_\varphi\psi = 0, \end{aligned} \quad (4.20)$$

com auxílio da tríade e a sua inversa (4.4) e da conexão 1-forma (4.10), de modo que

$$i\gamma^0\partial_t\psi + i\gamma^1\partial_\rho\psi - i\frac{\chi}{\rho}\gamma^2\partial_\rho\psi + i\frac{\gamma^2}{\rho}\left(\partial_\varphi + \frac{i}{4}\Sigma^{21} - \frac{i}{4}\Sigma^{12}\right)\psi + \nu\frac{\gamma^2}{\rho}T_\varphi\psi = 0, \quad (4.21)$$

pela definição $\Sigma^{ab} = \frac{i}{2}[\gamma^a, \gamma^b]$, então

$$\Sigma^{21} - \Sigma^{12} = i(\gamma^2\gamma^1 - \gamma^1\gamma^2).$$

sabendo disso, e manipulando a equação (4.21) através da utilização de propriedades das matrizes de Dirac ², enfim obteremos

$$i\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\gamma^1\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho}\right)\psi + i\frac{\gamma^2}{\rho}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \chi\frac{\partial}{\partial\rho} - i\nu T_\varphi\right)\psi = 0. \quad (4.22)$$

Temos que a interação entre o vetor traço T_φ com os férmions é dado de maneira análoga a interação dos férmions com o campo eletromagnético, de modo que a torção introduzida no acoplamento não-mínimo (4.19) não quebra a invariância de *gauge* da equação de Dirac. Isto significa que a equação de Dirac permanece a mesma perante a uma transformação do tipo:

$$T'_\mu(x) = T_\mu(x) - \frac{1}{\nu}\partial_\mu\theta(x), \quad (4.23)$$

onde $\psi' = e^{i\theta(x)}\psi$ e $\psi = e^{-i\theta(x)}\psi'$. Voltando ao problema, uma vez que o sistema é estacionário no tempo, podemos escrever a solução da equação (4.22) da seguinte maneira:

$$\psi(t, \rho, \varphi) = e^{-iEt}\psi(\rho, \varphi). \quad (4.24)$$

Aqui temos que E são os autovalores da energia. A partir do método de fase de Dirac [47], podemos escrever a solução da equação de Dirac na forma:

$$\psi(\rho, \varphi) = \exp\left[-i\int_{\Phi_0}^{\Phi} T_\varphi d\varphi\right]\psi_0(\rho, \varphi). \quad (4.25)$$

O termo exponencial corresponde a fase relativística adquirida pela função de onda da quasipartícula, e $\psi_0(\rho, \varphi)$ é a solução da equação de Dirac,

$$E\gamma^0\psi_0(\rho, \varphi) + i\gamma^1\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho}\right)\psi_0(\rho, \varphi) + i\frac{\gamma^2}{\rho}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \chi\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\psi_0(\rho, \varphi) = 0. \quad (4.26)$$

²As matrizes de Dirac obedecem a álgebra de Clifford e tem as seguintes propriedades:

- $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu}I_4$;
- $(\gamma^i)^2 = -I_4$, onde I_4 é a identidade 4x4.

Para encontrar a fase adquirida pela quasipartícula na presença de uma deslocação, vamos confinar este sistema quântico numa caixa perfeitamente refletora. Depois, transportaremos adiabaticamente a caixa através de um circuito C que circunda o defeito. O defeito está localizado na origem do sistema, de modo que o vetor que localiza a caixa em relação ao defeito é rotulada $\vec{R}$, e suas componentes são dadas por $R_i = (\rho_0, \varphi_0)$. O spinor é não-nulo no interior da caixa, e é dado por uma superposição de diferentes autofunções, isto significa que a quasipartícula vai ser descrita por um pacote de onda que corresponde a combinação linear de diferentes autofunções do hamiltoniano livre. Na presença do acoplamento T_φ a função de onda spinorial é sensível ao acoplamento com torção, podemos obter a fase geométrica dentro da caixa através de (4.25).

Utilizando o mesmo método descrito no capítulo 2 desta dissertação, obteremos a fase geométrica para a partícula neutra usando o método de fase de Dirac, e também a versão relativística da fase de Berry obtida em [49, 46, 51]. Deste modo, podemos escrevê-la como:

$$\Phi = i \oint_C \langle \psi(\vec{R}) | \nabla_R | \psi(\vec{R}) \rangle d\vec{R}. \quad (4.27)$$

Temos que o vetor $\vec{R} = \{R, \dots, R_i\}$ que localiza a caixa em relação ao defeito é o nosso parâmetro adiabático, ou seja, vamos mover a caixa em relação ao parâmetro $\vec{R}$ lentamente através do circuito C , de modo que possamos detectar a fase geométrica após este transporte. Também temos que ∇_R é o gradiente em relação ao parâmetro. Podemos escrever o pacote de onda dentro da caixa através de $\psi(\rho, \varphi) = \sum_n e^{\Phi} \psi_n(\rho, \varphi) = \sum_n e^{i \int_{\vec{R}} \mathcal{A}_n^{IJ} d\vec{R}} \psi_n(\vec{r} - \vec{R})$, onde o integrando da equação (4.27) na forma:

$$\mathcal{A}_n^{IJ} = \langle \psi_n^I(r_i - R_i) | \nabla_R | \psi_n^J(r_i - R_j) \rangle. \quad (4.28)$$

Onde I e J representam os possíveis estados degenerados, e determinam os elementos da matriz hermitiana $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$. Deste modo, o potencial 1-forma (4.28) faz surgir uma transformação unitária $U(\mathcal{N}) = \mathcal{P} \oint \mathcal{A}_n^{IJ}$ do grupo de simetria de *gauge*. Voltando ao sistema, a equação (4.28) pode ser calculada através de,

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^I(r_i - R_i) | \nabla_R | \psi_n^J(r_i - R_j) \rangle = \int \psi_n^{*I}(r_i - R_i) \{ -i\nu T_\varphi \psi_n^J(r_i - R_i) + \\ + \nabla_R \psi_n^J(r_i - R_i) \} dS; \end{aligned} \quad (4.29)$$

deste modo teremos,

$$\langle \psi_n^I(r_i - R_i) | \nabla_R | \psi_n^J(r_i - R_j) \rangle = -i\nu T_\varphi \delta_{IJ} \quad (4.30)$$

O segundo termo da equação torna-se nulo da mesma forma que foi discutida no capítulo 2. Aqui temos que $dS = \rho d\rho d\varphi$, e ψ_n é normalizado. Substituindo o resultado acima na equação (4.27), obtemos

$$\Phi_n(C) = \nu \oint_C T_\varphi d\vec{R}. \quad (4.31)$$

Utilizando o análogo do teorema de Stokes para formas diferenciais, temos

$$\begin{aligned} \Phi_n(C) &= \nu \iint \frac{\partial T_\varphi}{\partial x^\mu} \sqrt{-g} \, dx^\mu \wedge d\varphi; \\ &= \nu \iint \frac{\partial T_\varphi}{\partial \rho} \sqrt{-g} \, d\rho \wedge d\varphi, \end{aligned} \quad (4.32)$$

onde $g = \rho^2$ é o determinante do tensor métrico. Substituindo a equação (4.16) na equação acima, obteremos

$$\begin{aligned} \Phi_n(C) &= -2\pi\chi\nu \iint \frac{\partial \delta(\rho)}{\partial \rho} \delta(\varphi) \rho \, d\rho \wedge d\varphi; \\ &= 2\pi\chi\nu \end{aligned} \quad (4.33)$$

Obtivemos esse resultado devido as propriedades da derivada da distribuição de Dirac. Temos que C é a curva que envolve o defeito. A fase geométrica obtida depende diretamente do vetor de Burgers χ e do parâmetro adimensional do acoplamento ν . Este efeito pode ser interpretado como uma interferência entre a função de onda associada a quasipartícula na caixa transportada e a quasipartícula na caixa que segue a órbita ao longo do caminho C . A fase obtida em (4.33) é um elemento do grupo de simetria de *gauge* $U(1)$, ou seja, a fase que surge na função de onda spinorial devido a presença do defeito é *Abeliana*.

4.1.2 Fase Geométrica Não-Abeliana

Como vimos anteriormente, para descrever a interação da quasipartícula do grafeno com a deslocação, introduzimos um acoplamento do tipo não-mínimo (4.19) de modo que teremos o aparecimento de uma fase geométrica, em contraste a fase obtida por Mesaros *et al.* em [5]. Esta fase encontrada por Mesaros *et al.* ocorre devido a uma mudança do referencial local na dinâmica quântica da quasipartícula sem massa de Dirac. Realmente, partindo da equação (4.22) podemos mostrar o aparecimento de ambas as fases para o grafeno.

Até agora, temos usado a representação usual para equação de Dirac (2+1)-dimensional, como mostrado em (4.18). Contudo, a forma covariante da equação de Dirac (4.22) é independente da representação das matrizes γ^a . De modo que podemos construir a representação de Weyl [9] das matrizes de Dirac como na referência [5]. A partir das matrizes de Pauli 2×2 , τ^i e σ^i que atuam nos pontos de Fermi rotulados como $\mathcal{A}/\mathcal{B}$ respectivamente e que obedecem a relação $(\sigma^i \sigma^j + \sigma^j \sigma^i) = 2\eta^{ij}$, obtemos as matrizes de Dirac:

$$\begin{aligned}\gamma^0 = \tau^1 \otimes I &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}; \gamma^i = -i\tau^2 \otimes \sigma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}; \\ \Sigma^i = I \otimes \sigma^i &= \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}; \gamma^5 = \tau^3 \otimes I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (4.34)$$

Aqui I é a identidade 2×2 , e $\vec{\Sigma}$ é o vetor de spin. Através da representação de Weyl, podemos reescrever a solução da equação (4.22) como feito anteriormente em (4.26), tomando nesta representação que $\gamma^2 = i\gamma^1\Sigma^3$. Então a equação (4.26) pode ser escrita como,

$$E\gamma^0\psi_0(\rho, \varphi) + i\gamma^1 \left(\frac{\partial}{\partial \rho} - i\frac{\chi\Sigma^3}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right) \psi_0(\rho, \varphi) + i\frac{\gamma^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_0(\rho, \varphi) = 0. \quad (4.35)$$

Podemos então escrever a equação acima (4.35), como apresentado em [5], da seguinte forma:

$$\begin{aligned}i\gamma^a e^\mu_a(x) \partial_\mu \psi_0(\rho, \varphi) &= i\gamma^a (\delta^\mu_a + X^\mu_a) \partial_\mu \psi_0(\rho, \varphi); \\ &= i\gamma^\nu \partial_\nu \left[\exp \left(\int dx^\alpha X^\mu_\alpha \partial_\mu \right) \right] \psi_0(\rho, \varphi).\end{aligned}\quad (4.36)$$

Com X^μ_a corresponde a perturbação proporcional ao vetor de Burgers. Da equação acima, obtemos a transformação de holonomia através da teoria geométrica de defeitos e escrevendo a equação de Dirac no devido espaço-tempo curvo, em contraste a mesma fase obtida de modo qualitativo em [5], então

$$U = \exp \left(\int dx^\alpha X^\mu_\alpha \partial_\mu \right) = e^{\vec{b} \cdot (-i\vec{\nabla})} \quad (4.37)$$

A expressão acima é a holonomia experimentada pela a quase partícula no grafeno e corresponde a aquela obtida por Mesaros *et al.* [5], e também foi observado que o operador $-i\vec{\nabla}$ é o gerador contínuo de translação, de modo que podemos substituir o operador $-i\vec{\nabla}$ por $\vec{K}\tau_3$, que é o gerador de translação da rede. Assim teremos,

$$U = e^{\vec{b} \cdot \vec{K}\tau_3} = e^{2\pi\chi\hat{b} \cdot \vec{K}\tau_3}. \quad (4.38)$$

A expressão acima é uma *fase geométrica não-Abeliana* que corresponde a fase obtida por Mesáros *et al.* [5]. Esta holonomia é um efeito da translação na função de onda devido ao vetor de Burgers, causando assim uma mudança no referencial local.

4.2 Deslocação do Tipo Edge com Vetor de Burgers na direção x

Nesta seção vamos mostrar mais um exemplo do aparecimento de fases geométricas no grafeno na presença de uma deslocação do tipo edge. A diferença é que nesta situação, o vetor de Burgers está sendo descrito na direção x . O elemento de linha que descreve este defeito foi encontrado pelo Puntigam *et al.* em [42], e é escrito como

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + 2\frac{\chi}{r^2}dx(xdy - ydx) + \left(\frac{\chi}{r^2}\right)^2(xdy - ydx), \quad (4.39)$$

onde χ é, da mesma forma que anteriormente, um parâmetro constante que descreve a distorção do defeito e está relacionado ao vetor de Burgers na direção $\hat{x}$ através de $\chi = b^1/2\pi$. E também que $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Note que podemos reescrever esse elemento de linha, de modo que teremos:

$$ds^2 = -dt^2 + \left[\left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right)dx + \frac{\chi}{r^2}xdy \right]^2 + dy^2. \quad (4.40)$$

O tensor métrico para este elemento de linha pode ser escrito como,

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right)^2 & \frac{\chi}{r^2}x\left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right) \\ 0 & \frac{\chi}{r^2}x\left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right) & \left[1 + \left(\frac{\chi}{r^2}\right)^2x^2\right] \end{pmatrix}, \quad (4.41)$$

e o determinante do tensor métrico é dada por $g = \det(g_{\mu\nu}) = -\left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right)^2$. Definindo uma base não-coordenada $\hat{\theta}^a = e^a_\mu(x)$, e de modo que satisfaça a relação $g_{\mu\nu} = e^a_\mu(x)e^b_\nu(x)\eta_{ab}$, podemos escrevê-la da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \hat{\theta}^0 &= dt; \\ \hat{\theta}^1 &= \left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right)dx + \frac{\chi}{r^2}xdy; \\ \hat{\theta}^2 &= dy, \end{aligned} \quad (4.42)$$

E como consequência dessa escolha, temos que o campo tríade e a sua inversa são definidos como:

$$e^a_\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - \frac{\chi}{r^2}y) & \frac{\chi}{r^2}x \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad e^\mu_a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1 - \frac{\chi}{r^2}y)} & -\frac{\chi}{r^2} \frac{x}{(1 - \frac{\chi}{r^2}y)} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

Para encontrar a torção 2-forma e a conexão 1-forma, vamos recorrer as estruturas de Maurer-Cartan mais uma vez. Como dito anteriormente, a nossa torção esta no plano, assim temos que a componente $T^0 = 0$:

$$\begin{aligned} T^0 &= d\hat{\theta}^0 + \omega^0_b \wedge \hat{\theta}^b; \\ &= d(dt) + \omega^0_\mu{}^b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu; \\ &= \omega^0_\mu{}^b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu = 0; \\ \Rightarrow \omega^0_\mu{}^b &= \omega^b_\mu{}^0 = 0. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Como argumentado na seção anterior, a maneira mais simples para que a equação acima seja nula é que todas as suas componentes da conexão 1-forma relacionadas com T^0 sejam nulas. Neste caso, também consideramos que temos torção apenas no eixo 1, tornando a componente $T^2 = 0$. Da mesma forma argumentado acima, vemos que todas as componentes da conexão 1-forma relacionadas com a componente T^2 são nulas:

$$\begin{aligned} T^2 &= d\hat{\theta}^2 + \omega^2_b \wedge \hat{\theta}^b; \\ &= d(dy) + \omega^2_\mu{}^b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu; \\ &= \omega^2_\mu{}^b dx^\mu \wedge e^b_\nu dx^\nu = 0; \\ \Rightarrow \omega^2_\mu{}^b &= \omega^b_\mu{}^2 = 0. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Note que todas as componentes da conexão 1-forma são nulas, de modo que não haverá a contribuição das conexões 1-forma na derivada covariante. Vamos calcular agora a componente $T^1 \neq 0$, através das estruturas de Maurer-Cartan, e considerando que todas

as componentes da conexão 1-forma são nulos,

$$\begin{aligned}
T^1 &= d\hat{\theta}^1 = d(e^1_\mu(x)dx^\mu); \\
&= \frac{\partial}{\partial x^\alpha}(e^1_\mu) dx^\alpha \wedge dx^\mu; \\
&= \frac{\partial}{\partial y}(e^1_x) dy \wedge dx + \frac{\partial}{\partial x}(e^1_y) dx \wedge dy; \\
&= \frac{\partial}{\partial y} \left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right) dy \wedge dx + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\chi}{r^2}x\right) dx \wedge dy; \\
&= \chi \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{x^2 + y^2}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{y}{x^2 + y^2}\right) \right] dx \wedge dy.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Ao fazermos uma mudança de variável para coordenadas polares, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ e $\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$, e diferenciando a coordenada φ em termos das coordenadas cartesianas, então

$$\begin{aligned}
d\varphi &= \frac{d\varphi}{dx}dx + \frac{d\varphi}{dy}dy; \\
d\varphi &= -\frac{y}{x^2[1 + (y/x)^2]} dx + \frac{1}{[1 + (y/x)^2]} dy,
\end{aligned} \tag{4.47}$$

sabendo disto, podemos reescrever a equação (4.46) de tal maneira que teremos

$$\begin{aligned}
T^1 &= \chi [\partial_x \partial_y \varphi - \partial_y \partial_x \varphi] dx \wedge dy; \\
&= 2\pi\chi\delta(x)\delta(y) dx \wedge dy.
\end{aligned} \tag{4.48}$$

Como a variável φ não é uma diferencial exata, pois não é bem definida na origem, ela explode de modo que temos uma distribuição de Dirac $\delta^2(x, y)$. A partir da torção 2-forma, podemos obter o tensor de torção através da expressão $T^a = \frac{1}{2}T^a_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu$, assim como mostrado anteriormente obteremos que

$$\begin{aligned}
T^1 &= \frac{1}{2}(e^1_x T^x_{\mu\nu} + e^1_y T^y_{\mu\nu}) dx^\mu \wedge dx^\nu; \\
&= \frac{1}{2}(e^1_x T^x_{xy} + e^1_y T^y_{xy}) dx \wedge dy + \frac{1}{2}(e^1_x T^x_{yx} + e^1_y T^y_{yx}) dy \wedge dx
\end{aligned} \tag{4.49}$$

Como $e^1_x = \frac{\chi}{r^2}x$, as componentes T^y_{xy} e T^y_{yx} não carregam informação sobre o vetor de Burgers de modo que é imperioso serem nulas ($T^y_{xy} = T^y_{yx} = 0$). Deste modo temos que:

$$\begin{aligned}
T^1 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right) (T^x_{xy} - T^x_{yx}) dx \wedge dy; \\
&= \left(1 - \frac{\chi}{r^2}y\right) T^x_{xy} dx \wedge dy,
\end{aligned} \tag{4.50}$$

como $\sqrt{-g} = (1 - \frac{\chi}{r^2}y)$, vamos incorporá-lo ao elemento de área $dx \wedge dy$. Assim, comparando a equação acima com a equação (4.48), temos que o tensor de torção será

$$T_y = T_{yx}^x = -T_{xy}^x = -2\pi\chi\delta(x)\delta(y). \quad (4.51)$$

Como discutido na seção 4.1, temos aqui também que a única componente irreduzível do tensor de torção não-nulo é o vetor traço. O que torna imperioso a adição de um acoplamento do tipo não mínimo (4.19) para o estudo da interação da quasipartícula no grafeno com o defeito. E somando ao fato que todas as conexões 1-formas nesse caso são nula, de modo que o gradiente na equação de Dirac seja o gradiente usual. Desta forma, vamos escrever a equação de Dirac como na representação padrão das matrizes γ^a (4.18):

$$\begin{aligned} i\gamma^t\partial_t\psi + i\gamma^x\partial_x\psi + i\gamma^y\partial_y\psi + \nu\gamma^yT_y\psi &= 0; \\ ie^t_0\gamma^0\partial_t\psi + ie^x_1\gamma^1\partial_x\psi + ie^x_2\gamma^2\partial_x\psi + ie^y_2\gamma^2\partial_y\psi + \nu e^y_2\gamma^2T_y\psi &= 0. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Com o auxílio da tríade e da sua inversa (4.43), temos que

$$i\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\frac{\gamma^1}{(1 - \frac{\chi}{r^2}y)}\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\gamma^2\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\chi x}{r^2(1 - \frac{\chi}{r^2}y)}\frac{\partial}{\partial x} - i\nu T_y\right)\psi = 0. \quad (4.53)$$

Como o sistema é estacionário no tempo, podemos escrever a solução da equação (4.53) como:

$$\psi(t, x, y) = e^{-iEt}\psi(x, y), \quad (4.54)$$

Temos que E são os autovalores da energia, como dito na seção anterior. E a partir do método de fase de Dirac [47], a solução da equação (4.53) pode ser escrita como,

$$\psi(x, y) = \exp\left[-i\int_{Y_0}^Y T_y dy\right]\psi_0(x, y), \quad (4.55)$$

novamente, o termo exponencial é a fase relativística adquirida pela a função de onda spinorial da quasipartícula, e $\psi_0(x, y)$ é a solução da equação de Dirac:

$$iE\gamma^0\psi_0(x, y) + i\frac{\gamma^1}{(1 - \frac{\chi}{r^2}y)}\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x, y) + i\gamma^2\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\chi x}{r^2(1 - \frac{\chi}{r^2}y)}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0(x, y) = 0. \quad (4.56)$$

Confinando a quasipartícula numa caixa totalmente refletora. Então, transportamos esta caixa em torno do defeito através de um circuito C , como já foi discutido anteriormente. Vamos localizar o centro da caixa em relação ao defeito através do vetor $\vec{R}$, onde suas componentes são dadas $R_i = (x_0, y_0)$. Para obter a fase geométrica,

novamente usaremos o método de fase de Dirac para obtermos a conexão de Berry. Através da versão relativística da fase de Berry [46, 51], e utilizando os mesmos argumentos apresentados na seção 4.1, temos que

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_n^{IJ} &= \int \psi_n^{*I}(r_i - R_i) \{-i\nu T_y \psi_n^J(r_i - R_i) + \nabla_R \psi_n^J(r_i - R_i)\} dS; \\ &= -i\nu T_y \delta_{IJ}\end{aligned}\quad (4.57)$$

Os índices I e J representam possíveis estados degenerados. Onde $dS = dx dy$, e os ψ_n são normalizados. Então, a fase geométrica será:

$$\Phi_n(C) = \nu \oint T_y dR = \nu \iint \frac{\partial T_y}{\partial x^\mu} dx^\mu \wedge dy = 2\pi\nu\chi \quad (4.58)$$

Aqui mostramos o aparecimento de uma *fase geométrica Abelian* devido a interação entre a quasipartícula na caixa com a quasipartícula na caixa transportada. Note também que, se mudarmos a representação das matrizes γ^a para a representação de Weyl descrita em (4.34), podemos reescrever a equação (4.56), tal como feito na seção anterior, da seguinte forma:

$$iE\gamma^0\psi_0(x, y) + i\frac{\gamma^1}{(1 - \frac{x}{r^2}y)} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\chi\Sigma^3 x}{r^2} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x, y) + i\gamma^2 \frac{\partial}{\partial y} \psi_0(x, y) = 0, \quad (4.59)$$

mais uma vez podemos reescrever a equação acima de modo que obtemos a fase mostrada em [5]:

$$\begin{aligned}i\gamma^a e_a^\mu(x) \partial_\mu \psi_0(x, y) &= i\gamma^a (\delta_a^\mu + X_a^\mu) \partial_\mu \psi_0(x, y); \\ &= i\gamma^\nu \partial_\nu \left[\exp \left(\int dx^\alpha X_\alpha^\mu \partial_\mu \right) \right] \psi_0(x, y),\end{aligned}\quad (4.60)$$

aqui, temos novamente que X_a^μ corresponde a uma perturbação proporcional ao vetor de Burgers. Da equação (4.60) obtemos a transformação de holonomia,

$$U = \exp \left(\int dx^\alpha X_\alpha^\mu \partial_\mu \right) = e^{i\vec{b} \cdot (-i\vec{\nabla})}. \quad (4.61)$$

e ainda, substituindo o gerador contínuo de translação $-i\vec{\nabla}$ por $\vec{K}\tau_3$ que é o gerador de translação da rede. De modo que teremos,

$$U = e^{\vec{b} \cdot \vec{K}\tau_3} = e^{2\pi\chi\hat{b} \cdot \vec{K}\tau_3} = e^{2\pi\chi \cos\varphi \hat{x} \cdot \vec{K}\tau_3}. \quad (4.62)$$

Novamente, obtemos uma *fase geométrica não-Abelian* através da teoria geométrica de defeitos, em contraste a mesma fase obtida em [5].

Capítulo 5

Conclusão

Como foi mostrado no capítulo anterior, para os dois exemplos, na presença de uma deslocação do tipo edge, há o aparecimento de duas fases geométricas: uma fase geométrica abeliana e uma fase geométrica não-abeliana. A fase geométrica abeliana depende somente do vetor de Burgers de uma deslocação do tipo edge χ , e do parâmetro de acoplamento não-mínimo. Podemos interpretá-la como uma interferência entre a quasipartícula spinorial na caixa com a quasipartícula na caixa que segue a órbita ao longo do circuito C . A fase geométrica é abeliana pois pertence ao grupo de simetria $U(1)$. Note também que esta fase geométrica não depende da velocidade, de modo que a fase é não-dispersiva [58], o que nos leva a mostrar que a fase é independente da energia da quasipartícula. A fase abeliana é similar a fase obtida no efeito Aharonov-Bohm, onde a torção toma o lugar do potencial eletromagnético.

Em contraste com a fase abeliana, a fase geométrica não-abeliana é um efeito da translação na função de onda da quasipartícula, devido ao vetor de Burgers que caracteriza o defeito topológico, de modo que produz uma mudança no referencial local. De modo que o grafeno vai apresentar ambas contribuições. Essas fases podem ser verificadas através de estudos de espalhamentos, e outras propriedades de transporte no grafeno com deslocação do tipo edge.

Em resumo, o trabalho feito nessa dissertação foi usar a teoria geométrica de defeitos de Katanaev e Volovich para descrever um cristal na presença de uma deslocação do tipo edge através da geometria do espaço-tempo curvo, ou seja, descrever o espaço-tempo curvo através de uma métrica apropriada para a deslocação. Então, sabendo que

para a quasipartícula no grafeno é descrita pela equação de Dirac sem massa, reescrevemos a equação de Dirac usando a teoria de spinors num espaço-tempo curvo. A partir deste ponto, mostramos o surgimento de duas fases geométricas: Uma abeliana e uma não-abeliana. E mostramos também que a fase não-abeliana encontrada é a mesma fase descrita por Mesaros em *et al.*, porém obtida de forma qualitativa. A partir deste trabalho, o próximo passo é aplicar na área de computação quântica, utilizando estas fases geométricas encontradas para descrever portas lógicas na computação.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Cortijo e M. A. H. Vozmediano, *Electronic properties of curved graphene sheets*, EPL **77**, 47002 (2007).
- [2] A. Carpio, L. L. Bonilla, F. de Juan e M. A. H. Vozmediano, *Dislocations in graphene*, New Journal of Phys. **10**, 053021 (2008).
- [3] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson e F. Guinea, *Gauge fields in graphene*, Phys. Rep. **496**, 109-148 (2010).
- [4] A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano, *Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene*, Nuclear Phys. B **763**, 293-308 (2007).
- [5] A. Mesaros, D. Sadri e J. Zaanen, *Parallel Transport of Electrons in Graphene Parallels Gravity*, Phys. Rev. B **82**, 073405 (2010).
- [6] M. O. Katanaev e I. V. Volovich, *Theory of Defects in Solids and Three-Dimensional Gravity*, Ann. Phys. **216**, 1-28 (1992).
- [7] A. Mesaros, D. Sadri e J. Zaanen, *Berry phase of dislocations in graphene and valley conserving decoherence*, Phys. Rev. B **79**, 155111 (2009).
- [8] A. K. Geim, *Graphene: Status and Prospects*, Science **324**, 1530 (2009).
- [9] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov e J. P. Carbotte, *AC conductivity of graphene: from tight-binding to 2+1-dimensional quantum electrodynamics*, arXiv:0706.3016v2 (2007).
- [10] A. K. Geim e K. S. Novoselov, *The rise of graphene*, Nature Materials **6**, 183 (2007).

- [11] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos e A. A. Firsov, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature **438**, 197 (2005).
- [12] F. de Juan, A. Cortijo e M. A. H. Vozmediano, *Dislocations and torsion in graphene and related systems*, Nuclear Phys. B **828**, 625-637 (2010).
- [13] C. B. S. Furtado, F. Moraes e A. M. de M. Carvalho, *Geometric phases in graphitic cones*, Phys. Lett. A **372**, 5368-5371 (2008).
- [14] P. E. Lammert e V. H. Crespi, *Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties*, Phys. Review B **69**, 035406 (2004).
- [15] P. E. Lammert e V. H. Crespi, *Topological phases in graphitic cones*, Phys. Review Lett. **85**, 24 (2000).
- [16] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [17] L. D. Landau, *Zur theorie der phasenumwandlungen II*, Phys. Z. Sowjetunion **11**, 26-35 (1937).
- [18] R. E. Peierls, *Quelques proprietes typiques des corps solides*, Ann. I. H. Poincare **5**, 177-222 (1935).
- [19] K. V. Emtsev, A. Bostwick, K. Horn, J. Jobst, G. L. Kellogg, L. Ley, J. L. McChesney, T. Ohta, D. Waldmann, H. B. Weber e T. Seyller, *Towards wafer-size graphene layers by atmospheric pressure graphitization of silicon carbide*, Nature Mat. **8**, 203 (2009).
- [20] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim e H. L. Stormer, *Ultrahigh electron mobility in suspended graphene*, Solid State Commun. **146**, 351 (2008).
- [21] K. S. Novoselov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films Science*, **306**, 666-669 (2004).
- [22] A. F. Young e P. Kim, *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions*, Nature Phys. **5**, 222 (2009).

- [23] R. R. Nair, P. Blake, A. N. 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).
- [24] T. Eberlein, V. Bangert, R. R. Nair, R. Jones, M. Gass, A. L. Bleloch, K. S. Novoselov, A. Geim e P. R. Briddon, *Plasmon spectroscopy of free-standing graphene films*, Phys. Rev. B **77**, 233406 (2008).
- [25] J. K. Pachos, *Manifestations of topological effects in graphene*, Cont. Phys. **50**, 375 (2009).
- [26] A. C. Ferrari, *Raman Spectrum of Graphene and Graphene Layers*, Phys. Rev. Lett. **97**, 187401 (2006).
- [27] P. W. Sutter, J. I. Flege e E. A. Sutter, *Epitaxial graphene on ruthenium*, Nature Mat. **7**, 406 (2008).
- [28] J. González, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, *The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation*, Nuclear Phys. B **406**, 771-794 (1993).
- [29] S. Reich, J. Maultzsch e C. Thomsen, *Tight-binding description of graphene*, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002).
- [30] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Harcourt College Publishers, USA, 1976).
- [31] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, Phys. Rev. **71**, 9 (1947).
- [32] J. M. Luttinger e W. Kohn, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Phys. Rev. **97**, 4 (1955).
- [33] J. C. Slonczewski e P. R. Weiss, *Band Structure of Graphite*, Phys. Rev. **109**, 2 (1958).
- [34] D. P. DiVincenzo e E. J. Male, *Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds*, Phys. Rev. B **29**, 4 (1984).
- [35] C. Bena e G. Montambaux, *Remarks on the tight-binding model of graphene*, New Journal of Phys. **11**, 095003 (2009).

- [36] H. Kleinert, *Gauge Fields in condensend matter*, vol. 2 (World Scientific, Singapore 1989).
- [37] M. O. Katanaev, *Geometric theory of defects*, **arXiv:cond-mat/0407469v3** (2005).
- [38] I. L. Shapiro, *Physical aspects of the space-time torsion*, **arXiv:hep-th/0103093v1** (2001).
- [39] F. W. Hehl e Y. N. Obukhov, *Elie Cartan's torsion in geometry and in field theory, an essay*, Ann. de la Found. L. de Broglie **32**, 2-3 (2007).
- [40] S. M. Carroll, *Lecture Notes on General Relativity*, **arXiv:gr-qc/9712019v1** (1997).
- [41] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1982).
- [42] R. A. Puntigam e H. H. Soleng, *Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects*, **arXiv:gr-qc/9604057v2** (1997).
- [43] F. Moraes, *Condensed Matter Physics as a Laboratory for Gravitation and Cosmology*, Brazilian Journal of Phys., **30**, 2 (2000).
- [44] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu e J. Zwanzifer, *The geometric phase in quantum systems: foudations, mathematical concepts and applications in molecular and condensed matter physics* (Springer-Verlag, New York, 2003).
- [45] M. V. Berry, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, Proc. R. Soc. London A **392**, 45 (1984).
- [46] Y. Q. Cai e G. Papini, *Applying Berry's phase to problems involving weak gravitational and inertial fields*, Classical Quant. Grav. **7**, 269 (1990).
- [47] P. M. A. Dirac, *Quantised singularities in the electromagnetic field*, Proc. R. Soc. London, Ser. A **133**, 60 (1931).
- [48] M. V. Berry, *Exact Aharonov-Bohm wavefunction obtained by applying Dirac's magnetic phase factor*, Eur. Journal Phys. **1**, 240 (1980).
- [49] Z.-C Wang e B.-Z. Li, *Geometric phase in relativistic quantum theory*, Phys. Rev. A **60**, 4313 (1999).

- [50] D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 1995).
- [51] Y. Q. Cai e G. Papini, *A covariant generalization of Berry's phase*, Mod. Phys. Lett. A **4**, 1143 (1989).
- [52] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, USA, 1994).
- [53] K. C. Valanis e V. P. Panoskaltsis, *Material metric, connectivity and dislocations in continua*, Acta Mechanica **175**, 77 (2005).
- [54] N. D. Birrel e P. C. W. Davies, *Quantum Fields in Curved Space* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1972).
- [55] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity* (IE-Wiley, New York, 1982).
- [56] L. H. Ryder e I. L. Shapiro, *On the interaction of massive spinor particles with external electromagnetic and torsion fields*, Phys. Lett. A **247**, 21 (1998).
- [57] K. Bakke e C. Furtado, *Abelian geometric phase due to the presence of an edge dislocation*, Phys. Rev. A **87**, 012130 (2013).
- [58] A. Zeilinger, *Fundamental Aspects of Quantum Theory*, eds. V. Gorini e A. Frigerio (Plenum, New York, 1986).