



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

EVERTON CAVALCANTE

ASPECTOS GEOMÉTRICOS DA MOLÉCULA DE FULERENO
EM REFERENCIAIS NÃO-INERCIAIS

TESE DE DOUTORADO

JOÃO PESSOA, PB
FEVEREIRO DE 2015

EVERTON CAVALCANTE

**ASPECTOS GEOMÉTRICOS DA MOLÉCULA DE FULERENO
EM REFERENCIAIS NÃO-INERCIAIS**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós
Graduação em Física da Universidade Federal
da Paraíba como requisito parcial para obten-
ção do grau de Doutor em Física.*

Orientador:

Prof. Dr. Claudio Benedito Silva Furtado

JOÃO PESSOA, PB
FEVEREIRO DE 2015

C376a Cavalcante, Everton.
Aspectos geométricos da molécula de fulereno em
referenciais não-inerciais / Everton Cavalcante.- João Pessoa,
2015.
106f. : il.
Orientador: Claudio Benedito Silva Furtado
Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN
1. Física. 2. Fulereno. 3. Defeitos topológicos. 4. Teoria
Quântica de Campos em Espaços-Curvos. 5. Espaço-Tempo
do tipo-Gödel.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de Tese de **Doutorado** do aluno **Everton Cavalcante**, candidato ao Título de Doutor em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

1 Aos vinte e seis dias do mês de fevereiro do ano de dois mil e quinze, às 14h00, no
2 Auditório da Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar o candidato ao grau de Doutor em Física na área de Física da
5 Matéria Condensada, **Everton Cavalcante**. A comissão examinadora foi composta
6 pelos professores doutores: *Cláudio Furtado* (UFPB), orientador e presidente da banca
7 examinadora, *José Roberto Soares Nascimento* (UFPB), *Inácio de Almeida Pedrosa*
8 (UFPB), *Alexandre Carvalho* (UFAL) e *Carlos Chesman* (UFRN). Dando início aos
9 trabalhos, o Prof. *Cláudio Furtado* comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A
10 seguir, passou a palavra ao candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição
11 do trabalho de tese intitulado "*Aspectos geométricos da molécula de fulereno em*
12 *referenciais não-inerciais*". Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca
13 Examinadora que emitiu o seguinte parecer: "**aprovado**". Assim sendo, deve a
14 Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na
15 forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, servindo de Secretário,
16 lavrei a presente ata que vai assinada por mim mesmo e pelos membros da Banca
17 Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **26 de fevereiro de 2015**.

18

Prof. Dr. Cláudio Furtado
Orientador - UFPB

Prof. Dr. José Roberto Soares Nascimento
UFPB

Prof. Dr. Inácio de Almeida Pedrosa
UFPB

Prof. Dr. Alexandre Carvalho
UFAL

Prof. Dr. Carlos Chesman
UFRN

Danilo Wilson Lemos Menezes
Secretário

Cláudio Furtado

José Roberto Soares Nascimento

Inácio de Almeida Pedrosa

Alexandre Carvalho

Carlos Chesman

Danilo Wilson Lemos Menezes

Ao meu filho Heitor.

Agradecimentos

Primeiro agradeço a Deus por nos proporcionar o dom da vida e o Universo para que pudéssemos decifrar.

Ao meu filho Heitor por me fazer sorrir mais e acreditar sempre!

A minha esposa Lorena pelo amor e companheirismo.

Aos meus pais, Elton e Zenaide, pelo amor incondicional.

Aos meus irmãos, Helder e Erica, por existirem em minha vida e me proporcionarem boas lembranças da infância.

As minhas tias e primas, pelo afeto e apoio.

Aos amigos e amigas, onde citações seriam inviáveis, vai o agradecimento pelos bons momentos na UFPB.

Também não poderia faltar o agradecimento ao professor Claudio Furtado pela paciência, confiança e pelos preciosos conhecimentos passados. Assim como a todos os colegas do grupo de Física de Matéria Condensada, pelas discussões enriquecedoras.

Por último, agradeço ao programa de bolsas CAPES, pelo auxílio financeiro.

Quando a verdade não é nada senão a verdade, ela é antinatural; uma abstração que com nada se parece com o mundo real. Na natureza há sempre tantas coisas estranhas misturadas à verdade essencial! Eis porque a arte nos comove: precisamente porque ela está depurada de todas as impurezas da vida real.

—ALDOUS HUXLEY

Resumo

Nesta tese estudamos a dinâmica de portadores de carga, e as propriedades eletrônicas, na molécula de fulereno C_{60} . Caracterizando-a por um viés geométrico. Tanto em sistemas de referência inercial, como quando temos seu conteúdo de matéria sob rotação. Inicialmente abordamos o advento científico das formas alotrópicas do carbono e a importância da modelagem a baixas energias dos seus derivados. Onde mostramos que no limite de baixas energias, o grafeno - que trata-se da forma alotrópica bidimensional do carbono - pode ser descrito por uma teoria de férmions livres sem massa. Num segundo momento estendemos a teoria de férmions não massivos para a molécula de C_{60} . Assumindo que a rede hexagonal do grafeno pode inscrever o C_{60} ao introduzirmos alguns defeitos topológicos. Um breve estudo sobre os defeitos topológicos na matéria condensada foi feito. Onde, logo em seguida, partimos para uma descrição de tais defeitos via uma geometria não-euclidiana. Mostrando como os portadores de carga no meio enxergam os defeitos como campos de gauge. Em seguida começamos a expor os resultados desta tese. Primeiramente assumimos tratar o fulereno por uma métrica de uma esfera bidimensional com defeitos, e contendo um monopolo de t'Hooft-Polyakov fictício em seu centro. O C_{60} é ainda submetido a ação de um fluxo de Aharonov-Bohm advindo de uma corda magnética quiral transpassando seus polos. Obtemos assim o espectro e a predição de uma corrente persistente na molécula. Por fim retomamos a análise da molécula, agora com seu conteúdo de matéria sob rotação. Para isso assumimos tratar o fulereno por uma métrica do tipo Gödel com simetria esférica. Discutimos o problema da causalidade e obtemos espectro e corrente persistente em termos da vorticidade (Ω) do espaço-tempo.

Palavras-chave: Defeitos Topológicos, Fulereno, Teoria Quântica de Campos em Espaços-Curvos, Espaço-Tempo do tipo-Gödel

Abstract

In this thesis we study the dynamics of charge carriers, and the electronic properties, of the C_{60} fullerene molecule. Characterizing it by a geometric bias. In inertial reference systems and when we have your material under rotation content. Initially we discussed the scientific advent of carbon allotropes, and the importance of modelling its derivatives at low energies. We show that at low energies, the graphene - the two-dimensional carbon allotrope form - can be described for a non-massive theory of free fermions. At a second moment, we extended the non-massive free fermions theory for the C_{60} molecule. Assuming the hexagonal graphene network can be entered in fullerene when we introduce topological defects. A brief study of topological defects in condensed matter was done. And soon after, we made a description these defects via a non-Euclidean geometry. Showing how the charge carriers in the network see the defects like gauge fields. Then we began to expose the results of this thesis. First we assume the fullerene by a two-dimensional spherical metric with defects, containing a fictitious t'Hooft-Polyakov monopole in its center. The C_{60} is still subjected to the action of an Aharonov-Bohm flux arising of a magnetic wire running through its poles. So we get the spectrum, and the prediction of a persistent current in the molecule. Finally we return to the analysis of the molecule, now with your content of matter under rotation. For this, we studied a metric Gödel-type with spherical symmetry. We discussed the problem of causality and obtain the spectrum and the persistent current in terms of the vorticity (Ω) of spacetime.

Keywords: Topological Defects, Fullerene, Quantum Field Theory in Curved Spaces, Gödel-type Space-Times

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Figuras	viii
Introdução	1
1 O advento dos alótropos do carbono	5
1.1 Introdução:	5
1.2 Espectro de Energia:	7
1.3 Excitações em Baixas Energias:	11
1.4 Fullerenos e Nanotubos:	13
2 Defeitos Topológicos	18
2.1 Descrição de Defeitos em Cristais:	18
2.2 Derivada Covariante:	21
2.3 Tipos de Defeitos:	25
2.4 Campos de Gauge:	30
3 Molécula de fulereno na presença de um fluxo tipo Aharonov-Bohm	33
3.1 Introdução:	33
3.2 Modelos do contínuo para o Fulereno:	35
3.3 Fulereno sob fluxo de Aharonov-Bohm:	40
3.4 Espectro e Corrente Persistente:	44
4 Molécula de fulereno numa geometria tipo Gödel	49
4.1 Introdução:	49
4.2 Abordagem Geométrica do Fulereno num Referencial Não-Inercial:	50
4.3 Espectro e Corrente Persistente:	54
CONCLUSÕES	58

A Breve revisão da teoria de defeitos em cristais	60
B Breve revisão sobre os sólidos Platônicos	63
Referências Bibliográficas	68

Lista de Figuras

1.1	Periodicidade do potencial $U(\vec{r})$ [43].	8
1.2	Rede favo-de-mel planar [15].	9
1.3	Gráfico de superfície do espectro de energia [44].	11
1.4	Obra do arquiteto R. B. Fuller [59].	14
1.5	Representação do Fulereo C_{60} , destacando (a) os átomos e (b) as ligações interatômicas e estruturas tipo pentágono e hexágono [60].	14
1.6	Figura do Fulerno C_{20} [69].	15
1.7	Classificação dos Nanotubos de Carbono [60].	16
2.1	Rede hexagonal tipo favo-de-mel [87].	19
2.2	Exemplo de desclinação positiva (esquerda) e negativa (direita) no grafeno [110].	26
2.3	Exemplo de deslocação do tipo edge (esquerda) e deslocação do tipo screw (direita) [6].	27
2.4	Dipolos pentágono-heptágono, ou par de Stone-Wales [115].	29
2.5	Conexão das sub-redes por uma desclinação positiva [44].	31
2.6	Exemplo de contorno numa desclinação positiva conectando as sub-redes [130].	32
3.1	Figura do Fulerno C_{60} [138].	34
3.2	Figura do Fulerno C_{240} [138].	34
3.3	Figura do Fulerno C_{540} [138].	34
3.4	Figura do Icosaedro [152].	35
3.5	Face do Icosaedro para o C_{60} [15].	36
3.6	Figura do Tetraedro [153].	36
3.7	Figura do Octaedro [154].	37
3.8	Superfície Esférica com setor α removido.	41
B.1	Figura do Tetraedro Regular [181].	63
B.2	Figura do Octaedro Regular [182].	64
B.3	Figura do Icosaedro Regular [183].	64
B.4	Figura do Hexaedro Regular [184].	64
B.5	Figura do Dodecaedro Regular [185].	65
B.6	Órbitas dos Planetas segundo Kepler [180].	65

B.7	Planificação do vértice com seis triângulos equiláteros.	66
B.8	Planificação do vértice com quatro quadrados.	66
B.9	Planificação do vértice com três pentágonos.	67

Introdução

Com o advento do grafeno e a análise de suas propriedades estruturais e eletrônicas, incomuns aos demais derivados do carbono, diversos grupos experimentais e teóricos ao redor do mundo voltaram seus olhos ao material que pode mudar os padrões da nanociência e da nanotecnologia. De fato, ele é o único material genuinamente bidimensional da natureza, e possui propriedades estruturais e eletrônicas únicas.

Devido ao fato de um dos quatro elétrons dos carbonos que compõem a rede de grafeno estar deslocalizado, na ocorrência de neutralidade de carga os momentos possíveis não são quaisquer, mas definidos pela primeira zona de Brillouin nos pontos de Dirac. A medida que mais energia é fornecida ao sistema, subimos na direção da banda de condução. Enquanto que, a medida que extraímos energia, descemos na banda de valência. No grafeno as bandas de condução e valência se tocam nos pontos K ao nível de Fermi¹, e se afastam linearmente nos outros pontos de acordo com o momento do elétron. Ou seja, devido ao seu *gap* nulo, o grafeno pode ser considerado tanto condutor como semicondutor [1].

Sendo o grafeno um semicondutor de *gap* nulo, seus portadores de carga demonstram uma simetria de conjugação de carga entre as soluções para elétron e buraco. Acomodadas num dubleto por $SU(2)$. Tal propriedade simula uma característica típica de partículas ultra-relativísticas: a quiralidade². Isso faz do grafeno uma espécie de laboratório de mesa para efeitos da física de altas energias. Ou seja, apesar de modelos do contínuo para o grafeno estarem limitados a algumas dezenas de elétrons-volt (eV) em torno dos pontos K , as características singulares que os férmions do modelo apresentam, sinalizam o mesmo como uma alternativa para a pesquisa experimental na física de altas energias.

Em 2010, Andre Geim e Konstantin Novoselov foram laureados com o prêmio Nobel de física. Eles conseguiram isolar com sucesso planos de grafeno, ou seja, uma única folha de grafite, sob um substrato de Óxido de Silício (SiO_2), por meio de uma técnica conhecida como esfoliação mecânica [2]. Além das variadas características do grafeno, o que torna ainda mais interessante a descoberta desses cientistas, foi a quebra de paradigma quanto a possível inexistência de um cristal bidimensional enunciada por Peierls-Landau [3]. Imagine, por exemplo, que uma dada superfície tenha uma certa curvatura. Associada a essa curvatura temos uma

¹Maior nível de energia a fim de respeitar o princípio de exclusão de Pauli.

²A quiralidade é entendida na teoria quântica de campos como o número quântico correspondente aos autovalores da matriz de Dirac γ^5 .

energia de deformação que pode ser avaliada por uma variância $\langle \theta^2 \rangle$. Que é função da temperatura e das dimensões da material. E dá a média do ângulo da superfície ao quadrado. Ou seja, avalia de certo global a curvatura da superfície. É possível mostrar que, para qualquer temperatura $T \neq 0$, essa folha flutuando no vácuo tende a encontrar o outro lado, com $\langle \theta^2 \rangle \rightarrow \infty$. Formando uma estrutura tridimensional.

Uma discussão mais aprofundada sobre a descoberta experimental do grafeno, e suas propriedades, é feita no capítulo 1. Nele também mostramos que seu espectro de energia pode ser obtido por um modelo de *tight-binding*. E como o estudo das excitações a baixas energias revela um comportamento coletivo dos portadores de carga com a rede que pode ser descrito por férmions de Dirac quirais não massivos.

Ainda, outras estruturas alotrópicas do carbono podem ser obtidas utilizando a folha de grafeno como matriz. Por exemplo, o grafite é uma estrutura tridimensional gerada pelo empilhamento de folhas de grafeno, conectadas por ligações de Van der Waals. Enquanto que os nanotubos de carbono são estruturas formadas teoricamente com o enrolamento da matriz de grafeno como um tubo. Eles podem ser considerados estruturas unidimensionais, uma vez que são necessários milhares de nanotubos lado a lado para se obter a espessura de um fio de cabelo. Existem ainda os fulerenos, que são objeto de estudo dessa tese. Esses também são possíveis estruturas advindas da matriz de grafeno. Desde que defeitos topológicos sejam introduzidos adequadamente em sua estrutura. Pois só assim podemos enrolar uma folha numa esfera. Ele foi descoberto experimentalmente por Kroto e demais [4] quando tentavam obter estruturas lineares de carbono, existentes no espaço, simulando a atmosfera de gigantes vermelhas. Eles incidiram lasers num jato pulsado, de alta densidade, a uma temperatura na ordem de 10^4 °C. Observaram assim o depósito de certas estruturas clusterizadas na forma de bolas de futebol sob o aparato experimental. Estruturas estas que podem ser consideradas como estruturas de dimensionalidade zero (como um ponto), pois apresentam um diâmetro médio na ordem de um nanômetro.

No capítulo 2 atacamos o problema dos defeitos topológicos em cristais. Estabelecendo uma modelagem geométrica no limite do contínuo. Onde a estrutura dos defeitos sob a rede do cristal pode ser descrita por métricas de um espaço-tempo de Einstein-Cartan. De modo que singularidades associadas a quebra de simetria de rotação são associadas ao tensor de curvatura do espaço, e defeitos associados a quebra de simetria de translação são associados ao tensor de torção. Abordagem essa desenvolvida por Katanaev e Volovich [5, 6]. E que estabelece uma rica interface entre a física da matéria condensada e a relatividade geral.

O surgimento de defeitos topológicos nos cristais é proveniente da quebra de grupos de simetria em sua estrutura nas transições de fase [7]. Que termodinamicamente falando, são descritas por descontinuidades nos potenciais termodinâmicos. Em geral no potencial de Gibbs. De fato, quebras de simetria na física sempre revelam propriedades interessantes. Por exemplo,

a própria massa das partículas provêm de uma transição de fase em que as interações fraca e eletromagnética desacoplaram [8, 9]. Também, a existência de defeitos topológicos não compete somente ao âmbito da matéria condensada. Seu estudo se estende as cordas cósmicas [10, 11], monopolos globais [12], paredes de domínio [13], entre outros aspectos cosmológicos³. Tendo sido relacionado recentemente inclusive a detecção de sinais no BICEP2 [14]. Experimento que busca a detecção de ondas gravitacionais com o estudo da polarização da radiação cósmica de fundo.

No cenário geométrico de defeitos em cristais, a construção de uma derivada covariante para um spinor é de fundamental importância para que o modelo seja bem escrito no ponto de um espaço curvo por um referencial local. Assegurando o princípio da equivalência. Para sua construção é necessário estabelecermos uma conexão spinorial ($\Gamma_\mu(x)$) construída em termos da base de tetradas do referencial local. Que, como é bem discutido no capítulo 2, entra como um acoplamento de gauge que dá a interação do spinor com a curvatura do espaço.

Motivados pelas abordagens do contínuo em redes de grafeno, González, Guinea e Vozmediano, propuseram que tal estudo poderia se estender a moléculas de fulereno [15, 16]. Onde a rede favo-de-mel, característica do grafeno, poderia ser inscrita sob um icosaedro. Tendo assim as singularidades cônicas localizadas nos vértices do poliedro. No modelo eles ainda mostram que a relação de dispersão linear da rede permanece sobre o poliedro. De modo que os campos de gauge não-Abelianos característicos da mistura dos pontos de Fermi nas proximidades do defeito podem ser descritos por um monopolo de t'Hooft-Polyakov [16, 17] fictício no centro do poliedro. Esse modelo, bem como demais trabalhos complementares [18, 19, 20, 21] são discutidos no capítulo 3 dessa tese. Onde a introdução de campos elásticos e a aproximação como um isolante topológico esférico são abordados.

Como um dos resultados dessa tese [22], discutimos a abordagem da molécula de C_{60} sob a métrica de uma esfera bidimensional com defeitos, e sob o *background* de uma corda magnética quiral. Notamos ser esse um bom modelo nas proximidades do defeito. Ou seja, a baixas energias. Recuperamos assim os resultados obtidos em [18, 19, 20, 21] em suas dadas situações particulares. Nessa contribuição, discutida também no capítulo 3, além de obtermos o espectro, também predizemos (o obtemos a expressão) a existência de uma corrente persistente na molécula quanto exposta ao campo da corda magnética quiral.

Um outro resultado da tese é obtido quando assumimos o fulereno com seu conteúdo de matéria sob rotação [23]. A discussão é feita no capítulo 4. Nele descrevemos agora a molécula

³Cordas cósmicas, monopolos globais e paredes de domínio são exemplos de defeitos topológicos na gravitação. Em geral, surgem em teorias de gauge com quebra espontânea de simetria. Sendo preditos em algumas teorias de unificação na física de partículas. De fato, não existe nenhuma evidência experimental de monopolo global na natureza. No entanto, ele representa uma configuração (solução) estável de matéria, que pode ser originada em transições de fase no Universo primordial.

segundo uma métrica do tipo Gödel com simetria esférica. Discutimos o problema da causalidade no modelo, avaliando sob quais domínios dos parâmetros do sistema o modelo torna-se viável. Logo em seguida obtemos espectro e corrente persistente em termos da vorticidade (Ω) do espaço-tempo. Recuperando os resultados obtidos no caso inercial [22]. Por fim concluímos a tese com uma discussão dos resultados e perspectivas de trabalhos futuros.

O advento dos alótropos do carbono

1.1 Introdução:

O carbono é o sexto elemento na tabela periódica, e acredita-se atualmente que o mesmo se origina na nucleossíntese de gigantes vermelhas [24]. Ele é um elemento frequente numa vasta gama de compostos químicos, estando presente tanto em materiais raros como o diamante, como sendo figura chave em todos os compostos orgânicos. Tal notoriedade deve-se as tão variadas possibilidades desse material de ligar-se quimicamente aos demais átomos, podendo hibridizar-se via: sp , sp^2 e sp^3 . Tal flexibilidade química possibilita a existência de diversas configurações interatômicas energeticamente favoráveis e estáveis.

Dentre seus derivados encontram-se, além dos compostos bio-químicos (responsáveis pela existência da vida na Terra), polímeros, diamante, nanofitas, grafite, folhas de grafeno, nanotubos de carbono e a classe de fulerenos. Hoje extensivamente estudados pela nanociência e nanotecnologia, e objeto de estudo dessa tese.

As características de seus alótropos não fogem à impetuosa virtuosidade do elemento em questão. O diamante exibe-se na natureza, além de como um cristal de altíssimo valor comercial, também como o material mais duro da natureza; riscando todos os demais cristais. Ou seja, tendo o valor máximo (10) na escala de Mohs¹. O grafite, amplamente utilizado no dia-a-dia, possui um dos mais altos pontos de fusão da natureza²; servindo de recipiente para derreter outros materiais na indústria. O mesmo é ainda utilizado na composição de lubrificantes na indústria, e na fabricação de tintas. Também, quando misturado com argila muito fina, forma a bem conhecida mina dos lápis comuns. Atualmente uma única folha de grafite, conhecida como grafeno, encontra-se no *hall* (rol) dos materiais que mais despertam o interesse dos físicos ao redor no mundo.

Sabe-se atualmente que a miniaturização de circuitos eletrônicos integrados é extremamente valiosa para processos da engenharia eletrônica e de computação, pois aumenta o desempenho

¹ A escala de Mohs quantifica a dureza dos minerais, ou seja, a resistência que esse material oferece ao risco. O valor 1 é dado ao talco (o material menos duro da escala), já o valor 10 é dado ao diamante, que é a substância mais dura conhecida na natureza. O aço, por exemplo, tem valores que variam entre 4 e 4.5 na escala de Mohs [25].

² O grafite possui um ponto de fusão de aproximadamente 3700°C. Que é um pouco mais que o dobro do valor do ponto de fusão do aço: cerca de 1500°C [26].

dos circuitos (uma vez que aquecem menos) ao passo que diminuem o consumo de energia [27]. Em geral esses dispositivos são substratos de Silício enrolados sob uma porta dielétrica de Óxido de Silício (SiO_2). Contudo a miniaturização desses sistemas encontra um problema de escala, uma vez que com uma porta dielétrica suficientemente fina, surgem efeitos indesejados de tunelamento de elétrons. Tornando imperiosa uma abordagem quântica na tecnologia de circuitos integrados.

A espessura usual de semicondutores em circuitos é da ordem de 10 a 100 camadas atômicas [28]. Ademais, eles são considerados bidimensionais em funcionalidade porque os efeitos quânticos dos elétrons na direção "mais fina" são controláveis. No entanto, essa controlabilidade dos efeitos quânticos não é perfeita, e tem sua eficácia reduzida quanto menor o número de camadas atômicas. Gerando assim uma espécie de *cutoff* entre a miniaturização dos circuitos e a espessura do substratos de Silício que os compõem. Essas, dentre outras motivações que não se enquadram no escopo dessa tese, culminaram na busca por materiais que pudessem aprimorar ou substituir o Silício na eletrônica de escalas nanométricas.

Hoje em dia o grafeno vem tomando espaço de destaque na nanoeletrônica. Além de ser considerado o único material genuinamente bidimensional, ele é matriz para os outros alótropos do carbono; bem como possui propriedades estruturais, eletrônicas e de transporte sem precedentes na natureza. Tem sua estrutura química formada numa rede atômica tipo "honeycomb" (favoe-de-mel), onde cada átomo faz uma ligação sp^2 com seus três vizinhos mais próximos numa distância de aproximadamente 1,42 Angstrons. E uma das características singulares da folha de grafeno é que ele tanto pode ser considerado semicondutor quanto condutor [1]. Isso porque, como veremos adiante, na sua estrutura de bandas ele possui "gap" nulo. Sugerindo ainda demais características dos seus portadores de carga quanto a simetria de conjugação de carga; discutidas no decorrer dessa tese.

Vale ainda ressaltar que, apesar do grafite ser uma estrutura com uma ligação entre camadas tão frágil ao ponto de riscar o papel; uma única camada isolada de grafite, ou seja, o grafeno, é cerca de dez vezes mais resistente a tensões que o próprio aço. Sua resistência mecânica é aproximadamente 100 vezes maior que a do aço [29, 30], suporta uma densidade de corrente elétrica com seis ordens de grandeza a mais que o cobre [31]; constrói o menor, mais fino, e mais rápido transistor [32, 33, 2]. E, além de ser um excelente condutor elétrico [34] e térmico [35], absorve apenas cerca de 2% da intensidade da luz que incide sobre ele. Independente do comprimento de onda incidente [36].

De fato, a temperatura ambiente o grafeno conduz elétrons mais rápido que qualquer outra substância [37]. Sendo assim um forte candidato a substituir o silício, e outros semicondutores na nanoeletrônica. Seus portadores de carga são capazes de percorrer distâncias da ordem de micrômetros sem *scattering* (espalhamento) [38, 39]. Isso deve-se em parte ao fato de sua formação dá-se com uma densidade volumétrica de defeitos bastante reduzida em comparação

a cristais ordinários. Possibilitado que os portadores de carga no material viagem praticamente sem perdas de energia.

Sabemos ainda ser o grafeno um composto altamente instável mecânicamente; ou seja, ele pode perder sua forma planar, clusterizando, ou assumindo uma estrutura amorfa, com facilidade [40]. Isso justifica o interstício temporal de mais de meio século entre os primeiros indícios de uma estrutura bidimensional de grafite [1] e sua real descoberta em laboratório em 2004 [38].

Assim, muito se passou em termos de desenvolvimento experimental até que a equipe de A. K. Geim conseguisse isolar com sucesso planos de grafeno sob um substrato de Óxido de Silício (SiO_2), por meio de uma técnica conhecida como esfoliação mecânica. Algumas importantes revisões sobre o desenvolvimento experimental dessas e outras técnicas na busca pelo grafeno é encontrada nas referências [2, 38, 41].

1.2 Espectro de Energia:

No estudo de translações numa rede periódica infinita sempre admitimos que a função de onda correspondente a um determinado sítio da rede seja finita em seu domínio, a fim de evitar uma degenerescência infinita em um determinado estado. No entanto, assumimos também que a altura da barreira de potencial que separa os sítios seja infinita. Para um caso mais geral devemos considerar uma interação, mesmo que de curto alcance com sítios vizinhos, ao admitirmos uma barreira que já não é infinita. Ou seja, uma espécie de *hopping* (tunelamento) com o vizinho mais próximo.

Assumir uma interação de curto alcance é razoável para que a simetria de translação permaneça periódica. No intuito que, para um determinado operador de translação (T), possamos obter: $T|x\rangle = |x + \delta x\rangle$. Nesse sentido modelamos a interação de um n -ésimo sítio com a rede por meio de um vazamento da função de onda de um determinado sítio com o sítio vizinho. E essa é a essência do modelo de *tight-binding*; que como veremos irá conduzir à uma teoria de campo livre sobre a rede, ou um campo da rede.

Vale no entanto ressaltar que rigorosamente não temos mais uma equação de autovalores no n -ésimo sítio, mas sim uma espécie de aproximação da realidade. Ou seja, os "autovalores" do sítio formam agora uma banda energética em suas proximidades.

Também, as diferenças nas propriedades condutoras de metais, isolantes e semicondutores não podem ser compreendidas dentro do modelo de elétrons livres. Uma vez que o mesmo não consegue explicar, por exemplo, por que o carbono é um isolante, quando na forma de diamante, e um condutor, quando na forma de grafite. Tais propriedades são, de fato, consequências da estrutura de bandas nos materiais; e resultam da interação elétron-rede, e do preenchimento dos níveis de energia, obedecendo o princípio de Pauli[42].

Ao tratarmos o problema de um elétron que se movimenta dentro de uma rede periódica, assumimos tacitamente o teorema de Bloch. Onde para um elétron numa determinada posição $\vec{r}$ com respeito a um carço iônico, temos um potencial de interação $U(\vec{r})$, tal que (Ver Fig. 1.1)³:

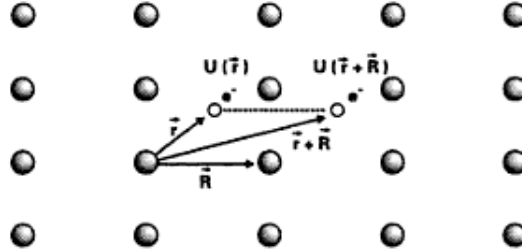


Figura 1.1 Periodicidade do potencial $U(\vec{r})$ [43].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = \epsilon \psi. \quad (1.1)$$

E, considerando um vetor da rede $\vec{R}$, tal que: $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$. Obtemos que as funções de onda só diferem por um fator de fase global:

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_k(\vec{r}). \quad (1.2)$$

De modo que podemos sempre modular a função de onda do elétron em termos uma amplitude u_k , tal que:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} u_k(\vec{r} - \vec{R}). \quad (1.3)$$

Assim, uma vez que a aproximação de *tight-binding* conduz ao espectro de uma teoria de campo livre na rede, para dois operadores de translação $\vec{T}_1$ e $\vec{T}_2$ (Ver Fig. 1.2), temos ⁴:

$$U(\vec{r} + p\vec{T}_1 + q\vec{T}_2) = U(\vec{r}), \quad p, q \in \mathbb{Z} \quad (1.4)$$

Se considerarmos $\phi(\vec{r})$ um certo autoestado eletrônico (orbital) normalizado e não-degenerado para um átomo isolado. Para a aproximação *tight-binding*, a superposição dos orbitais dos vizinhos mais próximos é pequena. Assim para o hamiltoniano do elétron no cristal, temos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} + \mathcal{H}_{cr}, \quad \mathcal{H}_{cr} \ll \mathcal{H}_{at}, \quad (1.5)$$

³Observe que aqui a interação elétron-elétrons não é considerada.

⁴Note que na Fig. 1.2, temos duas subredes: A subrede **A**, representada por $\circ$; e a subrede **B**, representada por $\bullet$.

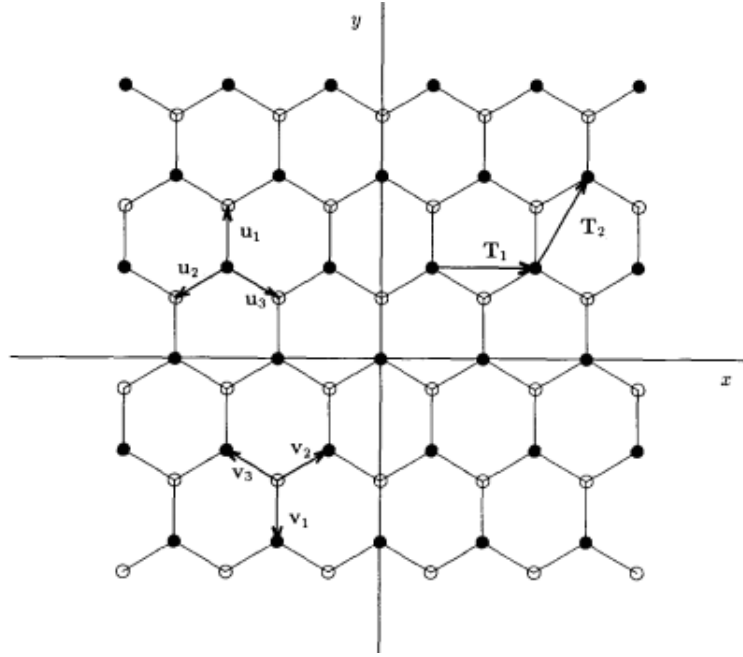


Figura 1.2 Rede favo-de-mel planar [15].

Onde $\mathcal{H}_{at}$ é a contribuição para o orbital isolado, e $\mathcal{H}_{cr}$ a contribuição da rede (ou do cristal). Desse modo, explorando o teorema de Bloch, a função de onda para um elétron na rede é uma combinação linear de orbitais atômicos (ϕ_n) dada por[15]:

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \phi_n(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad \vec{r}_i = p_i \vec{T}_1 + q_i \vec{T}_2, \quad (1.6)$$

onde N é o número de sítios da rede; sendo n o índice que rotula a banda, e k o índice que indexa os diferentes estados na banda.

Assumindo os orbitais localizados em torno dos sítios, e levando em conta a aproximação de primeiros vizinhos, o espectro da banda é tal que:

$$E_k \approx \int d^2\vec{r} \phi^*(\vec{r}) \mathcal{H} \phi(\vec{r}) + \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \int d^2\vec{r} \phi^*(\vec{r}) \mathcal{H} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i). \quad (1.7)$$

Podemos convenientemente transferir a aproximação de primeiros vizinhos para o modelo de sub-redes ao assumirmos dois orbitais, um de cada sub-rede (A e B), na célula unitária com distância interatômica $|\vec{d}|$. Ou seja, o espectro da banda pode ser descrito por:

$$E_k = \int d^2\vec{r} \phi^*(\vec{r}) \mathcal{H} \phi(\vec{r}), \quad (1.8)$$

com:

$$\phi(\vec{r}) = c_A \phi_A(\vec{r}) + c_B e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}} \phi_B(\vec{r} - \vec{d}). \quad (1.9)$$

Levando em conta a coordenatização, $\vec{u}_i$ e $\vec{v}_j$, das sub-redes dada na Fig. 1.2, podemos escrever o Hamiltoniano de *tight-binding* ($\mathcal{H}_{TB}$) para o grafeno:

$$E_k = \begin{pmatrix} c_A^* & c_B^* \end{pmatrix} \mathcal{H}_{TB} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_A^* & c_B^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & \gamma \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}_i} \\ \gamma \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_j} & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

com:

$$\beta = \int d^2\vec{r} \phi_A^*(\vec{r}) \mathcal{H} \phi_A(\vec{r}) = \int d^2\vec{r} \phi_B^*(\vec{r} - \vec{d}) \mathcal{H} \phi_B(\vec{r} - \vec{d}), \quad (1.11)$$

e:

$$\gamma = \int d^2\vec{r} \phi_A^*(\vec{r}) \mathcal{H} \phi_B(\vec{r} - \vec{u}_i) = \int d^2\vec{r} \phi_B^*(\vec{r} - \vec{d}) \mathcal{H} \phi_A(\vec{r} - \vec{d} - \vec{v}_j). \quad (1.12)$$

Aqui é interessante notar que tomamos $\beta = 0$, por tratar-se de um termo de auto-interação na célula unitária; que no caso do grafeno é composta apenas por carbono. Também temos o termo γ representando o *hopping* da rede. Ou seja, a probabilidade de transição por tunelamento.

Ao diagonalizarmos $\mathcal{H}_{TB}$, por uma equação de autovalores $\mathcal{H}_{TB}\Psi = E\Psi$, encontramos:

$$E_k = \pm \gamma \sqrt{\sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}_i} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_j}}. \quad (1.13)$$

Em uma folha de grafeno perfeita e infinita, define-se os vetores da base com origem na célula unitária. Realizando o somatório de acordo com a base estabelecida na Fig. 1.2, com origem na célula unitária. Temos:

$$E_k = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x d \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x d \right) \cos \left(\frac{3}{2} k_y d \right)}. \quad (1.14)$$

Assim, o espectro de uma partícula na rede consiste em seis pontos de Fermi que se tocam em $E = 0$ (Ver Fig. 1.3).

Ou seja, os zeros da equação (1.14) são seis pontos. Sendo que apenas dois desses pontos são não equivalentes [42]:

$$K_{\pm} = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \right). \quad (1.15)$$

Também, como há apenas dois elétrons livres por célula unitária, eles ocupam completamente a banda de condução vazia. Ou seja, a estrutura de bandas é semi-preenchida. Sinalizando o comportamento semi-metálico do grafeno.

Observe que aqui podemos adotar uma teoria de um campo livre sobre a rede, com um dubleto de spinores sinalizando as soluções de energia positiva e negativa. Esses, dentre outros argumentos, sugerem que as energias de excitação da rede podem ser descritas por uma teoria

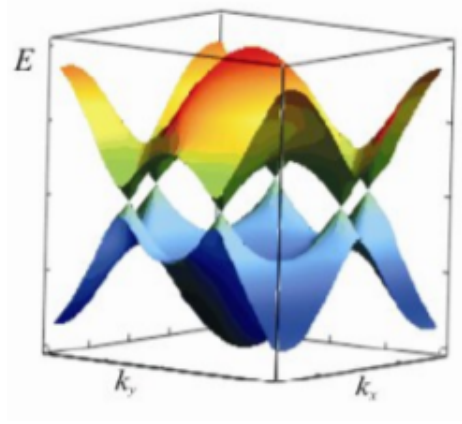


Figura 1.3 Gráfico de superfície do espectro de energia [44].

quântica de campo com um duplete de spinores em $2 + 1$ dimensões (duas dimensões espaciais e uma dimensão temporal).

1.3 Excitações em Baixas Energias:

Notamos na Fig. 1.3 que as superfícies de Fermi referentes as bandas de valência e condução no grafeno se encontram em seis pontos; sendo dois não-equivalentes. O *hopping* (tunelamento) entre as sub-redes A e B provoca a formação de duas bandas de energia, que tocam-se nos vértices da primeira zona de Brillouin; chamados de pontos de Dirac, ou pontos K . O que evidencia um *gap* nulo nas proximidades desses pontos. De fato, podemos expandir a equação (1.14) obtendo uma expressão aproximada para a relação de dispersão em torno dos pontos K [44]:

$$E = \pm \hbar k V_f. \quad (1.16)$$

Sendo $V_f = \frac{3\gamma d}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}$ a velocidade de Fermi. Esse tipo de relação de dispersão é semelhante ao de partículas relativísticas sem massa: $E^2 = p^2 c^2$. No entanto, aqui o papel da velocidade da luz é assumido pela velocidade de Fermi.

Estudar o comportamento dos férmions próximos aos pontos K é estudar o comportamento em baixas energias, ou pequenos momentos. Pois assim podemos assumir $\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = \vec{K}_\pm + \vec{p}$, com $|\vec{p}| \ll |\vec{K}_\pm|$. Desse modo garantindo a localidade dos orbitais atômicos.

Ao tomarmos uma expansão no hamiltoniano de *tight-binding* na equação (1.10), obtemos:

$$H_\pm = \frac{3}{2} \gamma d \begin{pmatrix} 0 & p_x \mp i p_y \\ p_x \pm i p_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar V_f \begin{pmatrix} 0 & p_x \mp i p_y \\ p_x \pm i p_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Que reescrito em termos das matrizes de Pauli (Ver pag. 10 da ref. [46]):

$$\begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = \hbar V_f \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \\ 0 & (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^* \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Ou seja, para um dubleto de spinores:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{k_+} \\ \psi_{k_-} \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

uma vez que: $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, temos:

$$-i\hbar V_f \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \psi = \epsilon \psi. \quad (1.20)$$

Observamos então que os portadores de carga no grafeno são descritos por uma equação de Dirac efetiva numa espécie de QED (*Quantum Electrodynamics*) em $2 + 1$ dimensões. No entanto o fato da velocidade de Fermi ser bem menor que a velocidade da luz ($V_f \approx c/300$), implica que o modelo para descrever a interação dos elétrons no grafeno, diferente da versão bidimensional da QED, não é invariante de Lorentz [45, 47]. De fato, o que temos é uma aproximação para um comportamento dos férmions com a rede, próximo aos pontos K , descrito por uma equação de Dirac em $2 + 1$ dimensões efetiva para férmions não-massivos. E, uma vez que o modelo é bem comportado nas proximidades dos pontos K , garantimos sua invariância por Lorentz localmente.

Em geral, temos equações de Schroedinger distintas para obter as soluções de elétrons e buracos. Contudo no grafeno, devido a uma relação de dispersão linear como da equação (1.16), tais soluções estão interconectadas, exibindo propriedades análogas a simetria de conjugação de carga da QED. De modo que os férmions no grafeno são descritos por dubletos caracterizados pelo pseudo-spin da rede ($\psi_{K_{\pm}}$). Ainda, o comportamento dos portadores de carga com a rede, assemelha-se ao de férmions quirais [2, 44, 48]. Sendo a quiralidade uma característica puramente relativística, representada pelos autovalores de γ^5 .

De forma tendenciosa, podemos dizer que a quiralidade é a projeção do spin da partícula na direção do movimento. Contudo, essa é a definição de helicidade: $\left(h = \frac{\vec{S} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|}\right)$. Vale ainda resaltar que a quiralidade é uma constante do movimento, comutando com o hamiltoniano, apenas para partículas sem massa. No entanto, ao passo que a helicidade é um número quântico apenas para partículas sem massa, a quiralidade é um número quântico para qualquer partícula [49, 50, 51]. Ao tratarmos de partículas ultra-relativísticas, ou no caso de portadores de carga no grafeno, as distinções das definições passam despercebidas. De modo que, comumente, adota-se na literatura de grafeno a quiralidade como sendo a projeção do spin no momento.

Ao interpretarmos a quiralidade no grafeno devemos atentar para certas sutilezas, pois numa física em $2 + 1$ dimensões o conceito de helicidade como simetria "espelho" perde o obviamente

o significado. Já a quiralidade como:

$$\gamma^5 \psi_{K_\sigma} = \sigma \psi_{K_\sigma}, \quad \sigma = \pm, \quad (1.21)$$

mantém a pertinência para férmions não-massivos. Surgindo como um número quântico do dubleto, e demonstrando a natureza quiral dos seus portadores de carga. Sendo os pontos $K_\pm$ seus autoestados. Para uma leitura mais aprofundada sobre as diferenças entre as interpretações da quiralidade no grafeno; três artigos pontuam muito bem o tema: [52, 53, 54]. Existem ainda abordagens sobre a quiralidade no grafeno em que o dubleto de spinores muda o sinal de carga sob um contorno fechado, numa espécie de fase de Berry [55].

Notamos aqui que o grafeno tem grande significância na física "além do silício". Pois o comportamento singular dos seus férmions assinala uma contribuição na física de altas-energias. Fazendo do grafeno uma espécie de laboratório de mesa para efeitos típicos da QED. Ao introduzirmos defeitos topológicos, esse material também é capaz de simular efeitos gravitacionais: como cordas cósmicas[10, 11, 56], paredes de domínio[13] e monopolos globais[12]; e servir de matriz para formação de outros compostos de carbono, como Fullerenos e Nanotubos.

1.4 Fullerenos e Nanotubos:

É bem sabido que o carbono tem alótropos de várias dimensionalidades. O grafeno, como já vimos, é bidimensional. O grafite, que é o empilhamento de folhas de grafeno, e o diamante são tridimensionais. Enquanto que também é possível obtermos estruturas unidimensionais: como os nanotubos de carbono; e estruturas de dimensionalidade zero: como fullerenos.

A unidimensionalidade dos nanotubos de carbono é justificada, pois são necessários milhares de nanotubos lado a lado para se obter a espessura de um fio de cabelo [57]. De fato, o diâmetro médio de um nanotubo é de 1 nm. Enquanto que o comprimento desses tem uma razão para com o diâmetro na proporção aproximada de $10^8 : 1$ [58]. Pelo mesmo raciocínio adotamos a classe de Fullerenos como materiais de dimensão zero. Pois tratam-se de moléculas de carbono enroladas como uma esfera, também com um diâmetro médio em torno de 1 nm. Na verdade o nome Fullerenos vem de uma homenagem ao arquiteto americano Richard Buckminster Fuller, pelas suas estruturas caracteristicamente esféricas (Ver. Fig. 1.4).

Foram Curl, Smalley e Kroto que foram laureados com o prêmio Nobel de Química, em 1996, pela descoberta da molécula de Fullerenos [4]. Eles obtiveram tal molécula quando tentavam obter estruturas lineares de carbono por meio da evaporação do grafite. Para isso incidiram lasers num jato pulsado de alta densidade, a uma temperatura na ordem de 10^4°C . Simulando assim a atmosfera de gigantes vermelhas; onde acredita-se acontecer a formação natural do carbono [24]. Uma vez evaporado o grafite, o carbono era condensado numa atmosfera de gás



Figura 1.4 Obra do arquiteto R. B. Fuller [59].

inerte, como o Hélio por exemplo. Assim, por meio de uma análise quantitativa via espectrômetro de massa, observaram o depósito de superfícies clusterizadas sob o aparato experimental, identificando o Fulereno como uma molécula enrolada como esfera contendo 60 átomos de carbono (Ver Fig. 1.5).

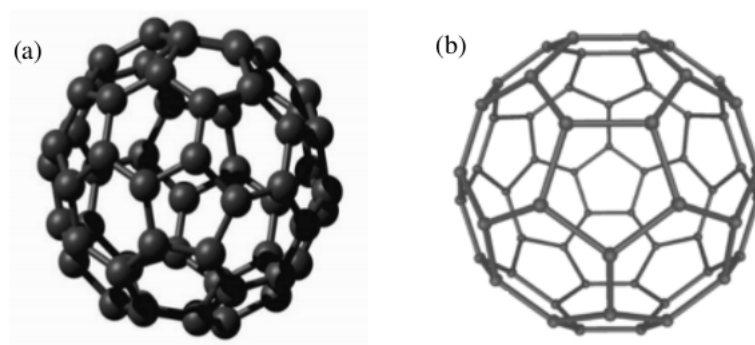


Figura 1.5 Representação do Fulereno C_{60} , destacando (a) os átomos e (b) as ligações interatômicas e estruturas tipo pentágono e hexágono [60].

A estrutura dos fulerenos é formada pela ligação das bordas de uma folha de grafeno. Os carbonos continuam unidos por fortes ligações sp^2 , como no grafeno, entretanto a curvatura trigonal das ligações leva a formação de uma estrutura pseudo sp^3 . Também, o fato de haver uma distorção do sistema sp^2 nos fulerenos, torna essas moléculas mais reativas a formação de estruturas funcionais. Ou seja, macromoléculas que podem ser exploradas em várias áreas da bioquímica, medicina e engenharias.

A estrutura do C_{60} (Ver Fig. 1.5) já foi amplamente estudada na literatura. Sendo submetida

a vários testes de estabilidade [61, 62]. Bem como o estudo de várias propriedades físicas foram realizados. Como energias eletrônicas [63, 64], espectros ópticos [65], modos vibracionais [66], propriedades elétricas e magnéticas [67, 68] entre outras. O C_{60} possui uma densidade média de $1,72 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, um calor de formação de 10,16 Kcal, uma energia de ligação de 7,4 eV, e uma distância interatômica de aproximadamente 0,144 nm [60].

Embora o C_{60} tenha sido a primeira molécula Fulereo identificada e também sintetizada em laboratório, bem como a mais conhecida. Existem diversas outras moléculas da classe de Fulerenos, com outras variantes quanto ao número de átomos de carbono (Por exemplo: C_{70} , C_{76} , C_{84} , C_{92} , C_{240} e C_{540}), que podem também assumir formas ovais. Existe ainda uma variante muito pouco estável: o fulereno C_{20} (Ver Fig. 1.6). Diferente das demais por não parecer ser subproduto da matriz hexagonal do grafeno, uma vez que apresenta apenas anéis pentagonais.



Figura 1.6 Figura do Fulerno C_{20} [69].

Também já foram encontrados Fulerenos em multicamadas, tipo uma cebola [70]. Bem como fulerenos que transportam outros átomos encapsulados em seu interior. Conhecidos como fulerenos endoédricos [71, 72, 73, 74]. Quando os átomos em seu interior são metais, temos os metafulerenos. Geralmente estáveis a temperatura ambiente. Possibilitando inclusive que certos aglomerados metálicos, incapazes de serem formados fora do encapsulado da molécula de fulereno, possam se estabilizar quando em seu interior. Servindo, por exemplo para a proteção de partículas sensíveis ao ar em seu transporte. Como para o depósito de partículas em meios de alta densidade [75]. Sabemos ainda que o fulereno C_{60} permanece estável mesmo a pressões hidrostáticas superiores a 20 GPa [76]. Gerando assim propostas para supermateriais, ainda mais duros que o diamante [77].

Já os nanotubos de carbono foram descobertos por S. Iijima, quando ele tentava aprimorar a técnica de obtenção de Fulerenos [78]. A ligação química dos nanotubos é composta inteiramente de orbitas sp^2 . Eles são cerca de 100000 vezes mais finos que um fio de cabelo e invisíveis até mesmo para microscópios óticos. Diferentemente do fulereno C_{60} , que pode ser

encontrado na poeira interestelar, os nanotubos de carbono não podem ser achados de forma natural nem no espaço e nem na Terra.

A forma como a folha de grafeno é envolvida formando o nanotubo pode ser representada pelo par de índices (n, m) . Conhecido na literatura por notação de Hamada [79]. De modo que o diâmetro de um nanotubo ideal pode ainda ser obtido por:

$$d = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}, \quad (1.22)$$

onde: $a = 0,246$ nm.

O par de índice (n, m) define ainda o comportamento metálico ou semicondutor dos nanotubos. Se $m = 0$ temos os nanotubos conhecidos como *Zigzag*. Já se $n = m$ temos os nanotubos conhecidos como *Armchair*. Nos demais casos temos os nanotubos *Quirais*. Existem ainda nanotubos de parede simples, ou *single-walled nanotubes* (SWNT). Bem como de parede dupla, ou *double-walled nanotubes* (DWNT); e paredes múltiplas, ou *multi-walled nanotubes* (MWNT) (Ver Fig. 1.7) [60].

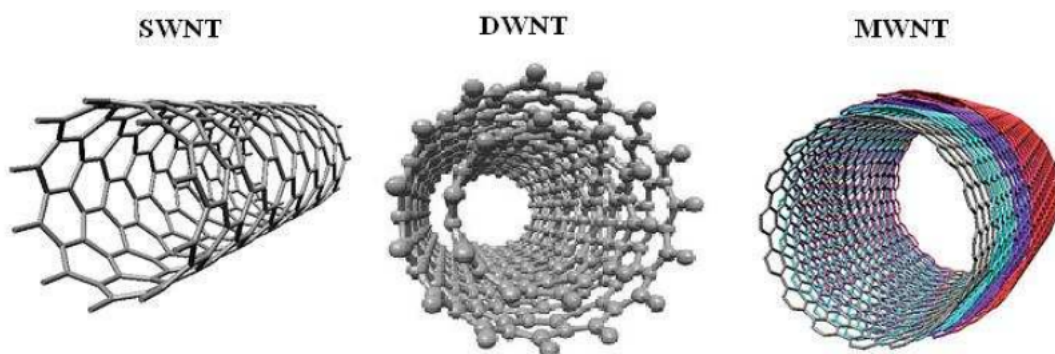


Figura 1.7 Classificação dos Nanotubos de Carbono [60].

A gama de aplicações que os nanotubos possuem é bem diversa. Dado os seu modo de formação, ou seja, como a folha de grafeno se enrolou para formar o nanotubo, podemos ter um nanotubo condutor, com uma eficiência de até 1000 vezes a dos fios de cobre tradicionais. Bem como, os que apresentam o comportamento semicondutor podem ser usados e circuitos refinados, devido as suas deimensões reduzidas. Podendo substituir os chips de silício atuais em nanoprocessadores. Podem também serem misturados a polímeros sintéticos endurecendo-os, ou tornando-os condutores elétricos.

O objeto de estudo dessa tese é o Fulereo, que é também um subproduto de uma folha matriz de grafeno. Para que a matriz de grafeno gere o C_{60} são necessárias mudanças estruturais no que competem a simetria hexagonal da rede favo-de-mel. Geometricamente só podemos obter o poliedro referente ao C_{60} quando combinamos 20 hexagonos e 12 pentagonos de carbono. De

fato, o C_{60} é o alótropo de carbono, relativo a classe de fulerenos, mais estável e que apresenta uma maior simetria esférica. Ou seja, quanto maior o número de anéis hexagonais na molécula, menor sua estabilidade (Com exceção do alotropo C_{20} , que não possui os anéis hexagonais). Isso porque a distribuição relativa dos doze anéis pentagonais (que é sempre a mesma) faz com que esses ocupem posições de modo a estarem cada vez mais tensionados [80, 81].

Veremos no capítulo que segue que essa mudança na simetria favo-de-mel provocada pela existência dos pentágonos é encarada como defeitos da rede; mais especificamente defeitos topológicos. Deremos prosseguimento a tese abordando alguns aspectos geométricos e topológicos no estudo do fulereno C_{60} . Para uma revisão mais aprofundada sobre a formação e as propriedades do Fulereno recomendamos as seguintes referências: [60, 82, 83, 84].

Defeitos Topológicos

Nesse capítulo vamos tomar uma breve revisão sobre o estudo de defeitos topológicos na matéria condensada. Iniciaremos com a descrição da teoria elástica de defeitos em cristais e a modelagem geométrica desses defeitos via uma geometria não-euclidiana. Num próximo momento debateremos a importância da derivada covariante no modelo, introduzindo conexões da métrica, e a relação de defeitos tipo desclinação e deslocação com o tensor de curvatura e de torção respectivamente, que são conceitos essenciais na formulação da relatividade geral. Em seguida estudaremos a interação de portadores de carga no material com os defeitos via campos de gauge. Analisando o significado físico e como se fixam tais interações de gauge em estruturas da matriz do grafeno.

2.1 Descrição de Defeitos em Cristais:

O conceito de simetria é de crucial importância na Física. Podemos afirmar que é uma característica histórica e ímpar da Física a tendência de orientar a construção de seus modelos a fim de obter simetrias que revelem comportamentos fundamentais da natureza. O próprio Heisenberg sugeriu em um dado ponto de sua carreira, ao notar a proximidade entre a massa do próton e do neutron, que uma certa simetria que levaria o próton no neutron surgiria se acaso pudessemos "desligar" a interação eletromagnética. É sabido que tal possibilidade não existe, contudo sabemos que quando um determinado modelo ou descrição de fenômeno não muda sob uma determinada transformação, tal modelo exibe uma certa simetria. O que mais adiante foi ainda determinado pela física Emmy Noether, que cada simetria corresponde a uma lei de conservação [85]. Por exemplo, se a Lagrangeana de um sistema não depende explicitamente do tempo, ou seja, é invariante sob translações temporais, então a energia do sistema é conservada. Já se o sistema é invariante sob translações espaciais referentes a uma dada coordenada generalizada, é o momento canônico associado a esse grau de liberdade que é conservado.

Quando tratamos de sólidos, devemos atentar para o fato que nem todo sólido é um cristal. Podemos classificá-los basicamente em três categorias: sólidos cristalizados, sólidos amorfos e quasi-cristais. Nos sólidos cristalizados podemos definir uma estrutura geométrica basilar que se reitera por toda a extensão do sólido, conhecida como rede. O que nos sólidos amorfos já não é possível. Pois nesses essa simetria não se estende mais adiante que os vizinhos mais

próximos. Já quanto aos quasi-cristais [86], esses exibem um espectro de difração discreto (característico dos cristais clássicos), no entanto não revelam uma estrutura de rede. Uma vez que o grafeno concilia as características de ordem (espectro discreto) e periodicidade, o temos como um exemplo bidimensional de um sólido cristalizado. Onde sua estrutura base é a rede hexagonal tipo favo-de-mel (Ver fig. 2.1).

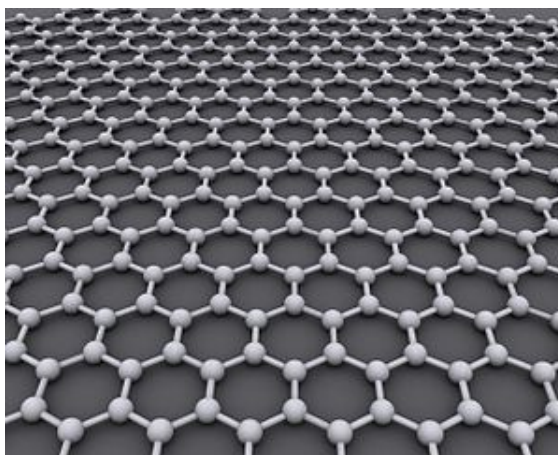


Figura 2.1 Rede hexagonal tipo favo-de-mel [87].

No entanto, é bem sabido que são justamente os defeitos apresentados numa determinada rede, bem como sua distribuição, que determinam muitas das propriedades físicas particulares de um dado cristal. Por defeito cristalino geralmente se quer dizer qualquer região em que o arranjo microscópico de íons difere drasticamente de um cristal perfeito. Tais defeitos são conhecidos como defeitos topológicos pois, como veremos adiante, influenciam diretamente na topologia que descreve o cristal. Eles surgem tanto em quebras de simetria provenientes de transições de fase do material, como por efeito de agentes externos. Tais defeitos são responsáveis, na grande maioria das vezes, por caracterizar a condutividade elétrica e térmica de cristais, plasticidade, ponto de fusão, elasticidade; bem como por pontuar padrões óticos do material, como por exemplo sua cor.

Sabemos também que na Física Estatística transições de fase caracterizam discontinuidades em certos potenciais termodinâmicos. Em geral no potencial de Gibbs: $G = U + PV - TS$. Diretamente associado ao trabalho útil realizado pelo sistema. Havendo tanto transições de primeira ordem (com coexistência de fases) como de segunda ordem (com o parâmetro de ordem se anulando continuamente). No entanto, vale aqui ressaltar que a formação desses defeitos por meio de transições fase, torna-se em muitas ocasiões factível, ou seja, energeticamente favorável, devido ao acréscimo de entropia nas transições [42].

Quando partimos para a modelagem de defeitos em sólidos, primeiramente precisamos retroceder para o caso do cristal ideal. Onde podemos definir um arranjo atômico periódico

perfeito sob a rede. Ao assumirmos $\vec{a}_i$ como vetores de base da rede ($|\vec{a}_i| = 1$), a posição de um n -ésimo átomo numa rede tridimensional é tal:

$$\vec{x}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3. \quad (2.1)$$

Assumindo então que quando forças externas são aplicadas sob o cristal, o mesmo irá sofrer deformações, de modo que a posição do n -ésimo átomo é mudada por:

$$\vec{x}_n \rightarrow \vec{x}'_n = \vec{x}_n + \vec{u}_n(\vec{x}). \quad (2.2)$$

Quando tomamos o limite da contínuo no cristal, ou seja, ao assumirmos o parâmetro da rede (que é dado pela distância interatômica: a) tendendo a zero ($a \rightarrow 0$), podemos assumir que as deformações no cristal são descritas por um campo vetorial de deslocamento, com componentes: $u_i(x)$. Assim, no limite do contínuo:

$$x'_i = x_i + u_i(x). \quad (2.3)$$

Desse modo a distância infinitesimal entre dois pontos no cristal, após uma deformação, é:

$$dx'_i = dx_i + \partial_j u_i dx^j, \quad (2.4)$$

e:

$$dx'^2_i = dx^2_i + 2\varepsilon_{ij} dx^i dx^j, \quad (2.5)$$

onde:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} [\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i u_k \partial_j u^k] \quad (2.6)$$

é conhecido como tensor de deformação. Que é um tensor simétrico. A fim de obtermos uma aproximação para defeitos lineares, tomamos [88, 89]:

$$\partial_i u_j \ll 1. \quad (2.7)$$

Desse modo podemos escrever o tensor de deformação como¹:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} [\partial_i u_j + \partial_j u_i]. \quad (2.8)$$

A conexão entre a teoria das deformações elásticas e a geometria diferencial foi feita por Katanaev e Volovich [5, 6] ao tomar um difeomorfismo ² entre a métrica euclidiana ($\delta_{ij} =$

¹Para maiores detalhes ver o Apêndice A. Recomendamos também, para uma leitura mais aprofundada as referências: [88, 89]

²Difeomorfismo é um isomorfismo (mapeamento um-para-um entre estruturas matemáticas, provido de inversa) entre variedades diferenciáveis, de modo que tanto a função quanto a inversa sejam suaves.

$diag(+++))$ do espaço do meio elástico com um espaço com curvatura e torção. Ou seja, um espaço provido de uma métrica:

$$g_{ij}(x) = \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} \frac{\partial x'^l}{\partial x^j} \delta_{kl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\varepsilon_{ij}. \quad (2.9)$$

Temos assim que as deformações na rede relacionam-se com um tensor métrico ($g_{ij}(x)$), ou métrica, de uma dada geometria não-euclidiana por:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\delta_{ij} - g_{ij}). \quad (2.10)$$

Observe que quando o campo vetorial responsável pelas deformações na rede se anula, a métrica $g_{ij}(x)$ é trivialmente levada a uma métrica euclidiana δ_{ij} . De fato, um observador externo vê o sistema cartesiano como um meio não deformado. Já quando o meio é deformado pela presença de defeitos, o observador verifica que as partículas do sistema exibem trajetórias referentes a métricas não-triviais ao sistema. De modo que podemos descrever a influência dos defeitos no meio por métricas de uma geometria com curvatura e torção. Mais especificamente uma geometria de Einstein-Cartan.

Na abordagem geométrica via geometria de Einstein-Cartan, um cristal é considerado um meio elástico contínuo com estrutura de spin. Se o campo vetorial responsável pelo deslocamento é uma função suave, temos somente tensões elásticas correspondentes a difeomorfismos no espaço euclidiano. Já se o campo vetorial $u_i(x)$ é descontínuo, temos defeitos na estrutura elástica do meio. Assim, o que Katanaev e Volovich fizeram foi fornecer uma teoria geométrica para uma distribuição estática de defeitos. Nesse modelo a curvatura e a torção assumem significado físico na descrição de tipos distintos de defeitos. Mais adiante nos ateremos com mais detalhes a alguns tipos de defeitos topológicos e sua relação com elementos da geometria de Einstein-Cartan.

Daremos prosseguimento a tese abordando o significado físico de alguns elementos da geometria de Einstein-Cartan; bem como a descrição a defeitos do tipo deslocação e desclinação.

2.2 Derivada Covariante:

É bem sabido na Física contemporânea que o conceito de vácuo, devido a flutuações quânticas e processos de criação e aniquilação de pares na QED, não pode ser mais entendido como meramente o espaço vazio. Pois o espaço é agora preenchido por campos. De fato, o vácuo é apenas o estado de menor energia do sistema. No entanto observadores acelerados não concordam com o estado de vácuo observado por referenciais inerciais. Nem mesmo com o estado de vácuo de demais observadores acelerados. Desse modo o próprio conceito de partícula fica

descaracterizado entre os referenciais [90, 91]. Já no espaço-tempo de Minkowski (relatividade restrita) o conceito de vácuo é invariante, pois todos os observadores estão em referenciais inerciais, e dessa forma o conceito de partícula é unívoco.

Quando partimos para a relatividade geral é razoável assumir que, pelo menos localmente, a relatividade restrita seja satisfeita. E esse é o princípio da equivalência, onde é sempre possível definir um sistema de referência inercial em qualquer ponto do espaço-tempo [92, 93]. Esses referenciais são conhecidos como referenciais locais. Pois transformam-se por Lorentz localmente. E podemos sempre conectá-lo a um sistema de coordenada arbitrário (x'^μ) por:

$$g_{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x^a}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x^b}{\partial x'^\nu} \eta_{ab}(x). \quad (2.11)$$

Onde η_{ab} é o tensor métrico de Minkowski. E, durante todo o desenvolvimento dessa tese, denotaremos os índices latinos ($a, b, c, \dots$) ao referencial local. Enquanto que índices gregos ($\mu, \nu, \dots$) serão relativos ao referencial de espaço-tempo.

Vale ainda rememorar que no espaço-tempo da teoria gravitacional Einsteiniana, a métrica:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (2.12)$$

é um invariante sob transformações de Lorentz. Sendo assim a métrica $g_{\mu\nu}(x)$ uma função das coordenadas do espaço-tempo. Que sob uma mudança de base:

$$ds^2 = g'_{ab} dx'^a dx'^b = g'_{ab} \frac{\partial x'^a}{\partial x^\mu} \frac{\partial x'^b}{\partial x^\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (2.13)$$

transforma-se como:

$$g_{\mu\nu}(x) = \frac{\partial x'^a}{\partial x^\mu} \frac{\partial x'^b}{\partial x^\nu} g'_{ab}(x'). \quad (2.14)$$

Ou seja, no ponto, o referencial arbitrário é conectado ao referencial local por elementos chamados tetradas ($e^a_\mu(x)$). Tais que:

$$g_{\mu\nu}(x) = e^a_\mu(x) e^b_\nu(x) \eta_{ab}. \quad (2.15)$$

De fato, são justamente as tetradas que definem os referenciais locais. Tais que satisfazem:

$$e^\mu_a(x) e^a_\nu(x) = \delta^\mu_\nu, \quad (2.16)$$

$$e^a_\mu(x) e^\mu_b(x) = \delta^a_b, \quad (2.17)$$

e tem inversa:

$$E^\mu_a = \eta_{ab} g^{\mu\nu} e^b_\nu. \quad (2.18)$$

Com efeito, as tetradas mapeiam o referencial de espaço-tempo no referencial local, de modo que a transformação entre as bases não-coordenada (θ^a) e de espaço-tempo (dx^μ) é dada por:

$$\theta^a = e^a_\mu(x) dx^\mu. \quad (2.19)$$

Bem como a invariância da métrica requer que:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = e^a_\mu e^b_\nu \eta_{ab} dx^\mu dx^\nu = \eta_{ab} \theta^a \theta^b. \quad (2.20)$$

Como é bem sabido na física contemporânea, a invariância segundo simetrias locais é de grande importancia para descrição das interações fundamentais. Foi usada para estabelecer a forma covariante das equações de Maxwell; bem como também revela a natureza física do potencial vetor eletromagnético no efeito Aharonov-Bohm [94]. Se pensarmos na descrição quântica do elétron (por exemplo), é possível estabelecer um parâmetro de fase constante (α) que deixe a equação da dinâmica invariante. No entanto, ao assumir um fase constante, estamos implicitamente assumindo que dois experimentadores, em referenciais diferentes, devem necessariamente assumir a mesma fase na função de onda. Todavia, parece mais razoável que os dois experimentadores (referenciais) possuam a liberdade de escolher um parâmetro de fase qualquer para a função de onda.

Baseado nessa liberdade de diferentes escolhas de fase, em diferentes pontos do espaço-tempo, é possível definir uma derivada que seja independente do sistema de coordenadas; conhecida como derivada covariante. Ou seja, quando tratamos de vetores, vamos derivar não apenas as componentes, mas o vetor como um todo. Derivando tanto as componentes como os versores. A mesma garante que o transporte de objetos (vetores, tensores, etc...) respeite as leis de transformação do grupo de simetria local. Mantendo a estrutura da equação de Dirac (ou outra qualquer) sob uma dada transformação.

Para vetores, o elemento geométrico que torna a derivada covariante é uma conexão de um-forma ($\omega_\mu^a_b$). De tal modo que para uma base não-coordenada θ^a de um referencial local, temos [92, 93, 95, 96]:

$$\nabla_\mu \theta^a = \omega_\mu^a_b \theta^b. \quad (2.21)$$

E para as componentes de um vetor, a derivada covariante é tal:

$$\nabla_\mu V^a = \partial_\mu V^a + \omega_\mu^a_b V^b. \quad (2.22)$$

A conexão de um-forma pode ainda ser escrita em termos das tetradas por:

$$\omega_\mu^a_b(x) = -e^v_b \nabla_\mu e^a_v. \quad (2.23)$$

Tais conexões são relacionadas com a base do referencial local (não-coordenada) e a torção (T^a) do espaço pela primeira equação de estrutura de Maurer-Cartan [97, 98, 99]:

$$d\theta^a + \omega^a_b \wedge \theta^b = T^a. \quad (2.24)$$

Ou:

$$d\theta^a + \omega_\mu^a e^b_\nu dx^\mu \wedge dx^\nu = T^a. \quad (2.25)$$

Onde a torção pode ainda ser escrita como:

$$T^a = T^a_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu. \quad (2.26)$$

E o produto cunha ($\wedge$) entre as um-formas é definido por:

$$dx^\mu \wedge dx^\nu = \frac{1}{2}(dx^\mu \otimes dx^\nu - dx^\nu \otimes dx^\mu). \quad (2.27)$$

No entanto, como vimos um cristal é um meio elástico provido de estrutura de spin. Uma vez que a matriz de grafeno é geometricamente descrita desse modo, no estudo dessa tese estamos interessados em como obter a derivada covariante para spinores de duas componentes que representem as quasi-partículas da rede. A derivada covariante de um spinor no espaço-tempo curvo é dada por [95, 100, 101, 102]:

$$\nabla_\mu \Psi = \partial_\mu \Psi - \Gamma_\mu \Psi. \quad (2.28)$$

Que também transforma-se como um spinor em cada ponto do espaço-tempo. E onde Γ_μ é conhecido como conexão spinorial. E pode ser escrita como [89]:

$$\Gamma_\mu(x) = \frac{i}{4}[\omega_{\mu ab}(x) + K_{\mu ab}(x)]\Sigma^{ab}. \quad (2.29)$$

Sendo $K_{\mu ab}(x)$ a conexão associada ao tensor de contorção $K^a_b = K^a_b{}^\mu dx^\mu$. Que relaciona-se com a torção por:

$$T^a = K^a_b \wedge \theta^b. \quad (2.30)$$

E Σ^{ab} é o tensor de spin da teoria de campos. Dado por [50]:

$$\Sigma^{ab} = \frac{1}{2}[\gamma^a, \gamma^b]. \quad (2.31)$$

Aqui vale acentuar que no estudo de defeitos em estruturas de grafeno usamos o pano de fundo da teoria quântica de campos em espaços curvos. E que o acoplamento dos campos dos portadores de carga no grafeno não depende dos parâmetros da rede.

Devemos, no entanto atentar, que por tratarmos de uma distribuição estática de defeitos, nesses modelos fixamos a curvatura e a torção do espaço. O que nem sempre pode acontecer na relatividade geral. Ou seja, buscamos apenas remodelar as grandezas envolvidas no problema dos defeitos em cristais a fim de obter propriedades do sistema. Vale ainda reforçar que a torção foi introduzida na relatividade a fim de lidar com o spin; enquanto que a curvatura está relacionada a massa. Interpretações que não trazemos na abordagem geométrica de defeitos.

De fato, estudar as propriedades em baixas energias no grafeno na presença de defeitos baseia-se na hipótese que a descrição das quasipartículas como férmions de Dirac não-massivos permanece legítima quando a distribuição desses defeitos é diluída. Bem como, tratamos o problema negligenciando o acoplamento spin-orbita, por ser diminuto no grafeno.

Observe ainda que quando partimos para a abordagem da teoria quântica de campos numa geometria de Einstein-Cartan, ou ainda, quando partimos para o referencial de espaço-tempo; a invariância por Lorentz é dada localmente. Garantindo o princípio da equivalência da relatividade geral. Assim, uma vez que a simetria do grupo é local, dependendo do ponto. O transporte de objetos, que se transformam sob o grupo, de um ponto a outro infinitesimalmente próximo deve conter um termo que garanta que ele ainda se transforme sob o grupo local. Ou seja, para que possamos garantir que a derivada de um spinor transforme-se também como um spinor é necessário definir a derivada covariante em termos da conexão spinorial no ponto ($\Gamma_\mu(x)$).

Pelo mesmo raciocínio a equação de Dirac num espaço-tempo curvo e com torção apresenta diferenças fundamentais quanto a mesma para o caso trivial, ou seja, da relatividade restrita. No caso trivial, o grupo de Lorentz é o grupo de simetria do próprio espaço-tempo. Já na geometria de Einstein-Cartan o spinor é definido segundo uma estrutura local de Lorentz, que existe independentemente em cada ponto do espaço. Emancipado do grupo de transformação geral do espaço-tempo em questão. Tal restrição impõe ainda que as próprias matrizes γ^μ também transformem-se pelas tetradas:

$$\gamma^\mu(x) = e^\mu_a(x)\gamma^a. \quad (2.32)$$

Já que elas asseguram a álgebra de Clifford que gera o grupo de Lorentz no ponto.

Dando prosseguimento ao texto vamos nos ater a descrição de certos tipos de defeitos topológicos em cristais, suas propriedades estruturais, e a íntima relação desses com elementos da geometria de Einstein-Cartan.

2.3 Tipos de Defeitos:

Como temos visto no decorrer do texto, existem propriedades dos cristais que não estão relacionadas as propriedades elásticas do meio. Ferromagnetismo, cristais líquidos e gelos

de spin, por exemplo, estão relacionados a defeitos na estrutura de spin do meio [103, 104, 105]. Defeitos esses conhecidos como desclinações. Existem também defeitos que ilustram, por exemplo, a diferença na ordem de grandeza do cisalhamento crítico previsto pelo modelo do cristal ideal, e o cisalhamento crítico observado experimentalmente [42]. Defeitos esses conhecidos como deslocações. Observados pela primeira vez por Bragg e Nye em 1947 [106].

A classificação desses defeitos é feita por processos Volterra [107]. Que são processos descritos como processo de "cortar e colar". Temos ainda que os defeitos tipo desclinação estão associados à simetria de rotação da rede. Estas são classificadas como positivas ou negativas, caso o processo de "cortar e colar" de Volterra retire ou introduza uma porção de matéria do meio, respectivamente. Observe na figura (2.2) defeitos do tipo desclinação positiva e negativa numa estrutura de grafeno. Na desclinação positiva, no ponto do defeito, temos a substituição do anel hexagonal da rede por um pentágono. Já na desclinação negativa, no ponto do defeito, temos a substituição do anel hexagonal da rede por um heptágono.

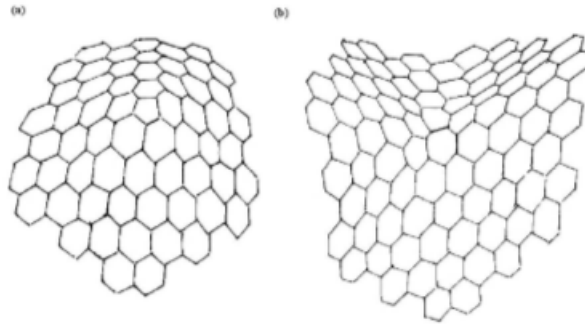


Figura 2.2 Exemplo de desclinação positiva (esquerda) e negativa (direita) no grafeno [110].

Observe que a substituição do anel hexagonal por um pentágono é análogo a retirarmos (cortarmos) um setor $\pi/3$ da rede no ponto do defeito. Enquanto que substituir por um heptágono é mesmo que introduzir (colar) o mesmo setor no ponto do defeito. Note ainda que desclinações provocam uma certa curvatura local no ponto do defeito. A medida da curvatura da desclinação é dada na teoria elástica de defeitos pelo vetor de Frank. Mais adiante veremos a relação que existe entre o vetor de Frank e o tensor de curvatura na descrição geométrica dos defeitos.

Os defeitos lineares conhecidos como deslocações são defeitos associados a simetria translacional da rede. A medida da deslocação é dada pelo vetor de Burgers ($\vec{b}$). Que não é necessariamente constante no corte do defeito. Por exemplo a figura (2.3) mostra a diferença entre uma deslocação do tipo *edge* (esquerda) e uma deslocação do tipo *screw* (direita). Onde no tipo *edge* o vetor de Burgers é perpendicular a linha de deslocação; já no tipo *screw* o vetor de Burgers é paralelo a linha de deslocação.

Como vimos anteriormente, de acordo com a teoria das deformações elásticas, o vetor $u^i(x)$

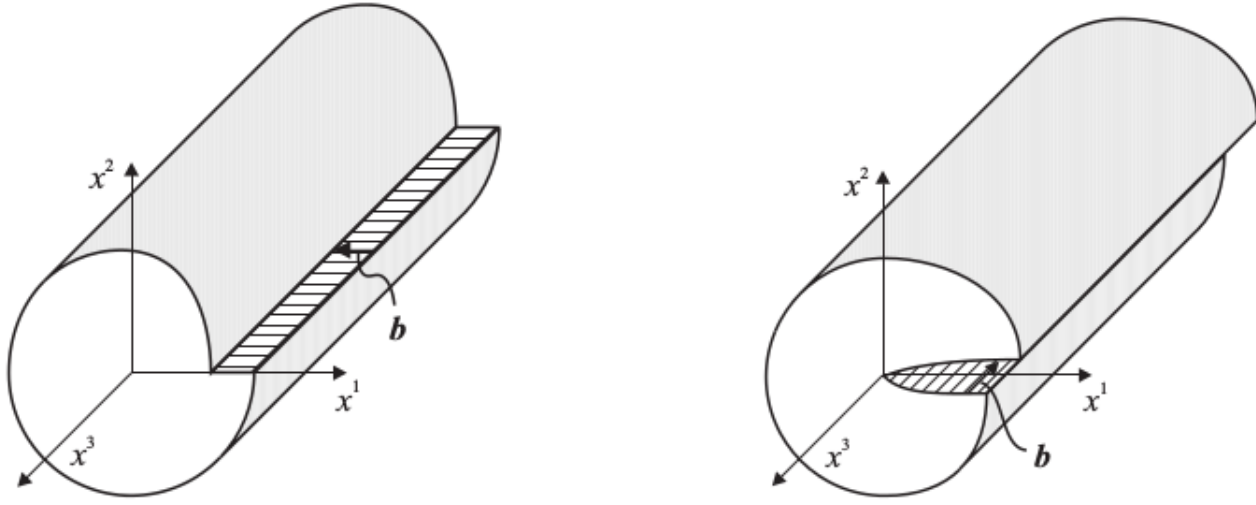


Figura 2.3 Exemplo de deslocação do tipo edge (esquerda) e deslocação do tipo screw (direita) [6].

não é suave na presença de deslocações. Aqui no entanto nós assumimos que suas derivadas $\partial_j u^i(x)$ sejam suaves sob o corte. O que é justificável para que possamos definir o tensor de deformação:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (2.33)$$

Possibilitando assim um estado de equilíbrio do defeito [6]. Desse modo, se tomarmos um contorno fechado em torno da deslocação temos as componentes do vetor de Burgers:

$$\oint dx^\mu \partial_\mu u^i(x) = -b^i. \quad (2.34)$$

Ainda, uma vez que as componentes do vetor deslocamento podem ser escritas em termos do espaço tangente no ponto [95]: $e^i_\mu(x) = -\partial_\mu u^i(x)$, podemos escrever as componentes do vetor de Burgers em termos da base de tetradas por:

$$b^i = \oint dx^\mu e^i_\mu(x). \quad (2.35)$$

Ou ainda em termos do elemento de superfície sob o defeito ($dx^\mu \wedge dx^\nu$) por:

$$b^i = \int \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu (\partial_\mu e^i_\nu - \partial_\nu e^i_\mu). \quad (2.36)$$

De modo que podemos estabelecer um critério necessario para a presença de deslocações. Ou seja, devemos ter:

$$\partial_\mu e^i_\nu - \partial_\nu e^i_\mu \neq 0. \quad (2.37)$$

O que aqui é interessante notar, revendo a equação (2.23), é que a expressão (2.36) difere apenas quanto a conexão de um-forma da expressão para a torção na geometria de Einstein-Cartan [93, 96, 97]:

$$T_{\mu\nu}^i = \partial_\mu e_\nu^i - e_\mu^j \omega_\nu^i{}_j. \quad (2.38)$$

Desse modo, foi postulado por Katanaev e Volovich que o vetor de Burgers corresponde a integral do tensor de torção sob uma superfície $(dx^\mu \wedge dx^\nu)$ do defeito. Ou seja, é possível escrever as componentes do vetor de Burgers em termos da torção por [5, 6]:

$$b^i = \int \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu T_{\mu\nu}^i. \quad (2.39)$$

Podemos notar que o tensor de torção assume na teoria de defeitos o significado físico de densidade superficial de vetores de Burgers; ou ademais, de deslocamentos.

Agora, retomando a teoria elástica, podemos admitir a existência de um vetor unitário $n^i(x)$ existente em todos os pontos do meio material. E que a conexão entre os pontos na geometria provida de spin é dada pelo elemento $\omega^{ij} = \omega_\mu^{ij} dx^\mu$ da conexão de um-forma. Um defeito tipo desclinação, que está associado a defeitos na estrutura de spin, tem sua medida descrita por um vetor de Frank:

$$\Omega^{ij} = \oint_C dx^\mu \partial_\mu \omega^{ij}. \quad (2.40)$$

Onde a integral percorre um caminho fechado ao redor do eixo da desclinação. O comprimento do vetor de Frank será então igual ao modulo do ângulo da rotação do campo vetorial $n^i(x)$ em torno do eixo da desclinação [108, 109].

Pelo mesmo raciocínio usado em defeitos tipo deslocação, nas desclinações o campo $\omega^{ij}(x)$ não é suave no ponto do defeito. Podemos ainda escrever o vetor de Frank em termos de uma integral de superfície que contorna o defeito como:

$$\Omega^{ij} = \int \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu (\partial_\mu \omega_\nu^{ij} - \partial_\nu \omega_\mu^{ij}). \quad (2.41)$$

Assim, mais uma vez encontramos um critério de existência. Agora para presença de desclinações:

$$\partial_\mu \omega_\nu^{ij} - \partial_\nu \omega_\mu^{ij} \neq 0. \quad (2.42)$$

Já aqui também é possível notar que a expressão (2.41) difere apenas quanto ao termo de conexão de um-forma da expressão para o tensor de curvatura na geometria de Einstein-Cartan[93, 96, 97]:

$$R_{\mu\nu j}^i = \partial_\mu \omega_{\nu j}^i - \omega_{\mu j}^k \omega_{\nu k}^i. \quad (2.43)$$

Aqui, análogo ao caso das deslocções, é o tensor de curvatura que assume a interpretação de densidade superficial de vetores de Frank:

$$\Omega^{ij} = \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu R_{\mu\nu}^{ij}. \quad (2.44)$$

Recapitulando, notamos que os defeitos tipo deslocção estão associados a descontinuidades (defeitos) no meio elástico, enquanto que desclinações estão associadas a descontinuidades (defeitos) na estrutura de spin. Quando partimos para uma abordagem geométrica, a torção associa-se a densidade de deslocções (vetores de Burgers), enquanto a curvatura associa-se a densidade de desclinações (vetores de Frank).

De fato, desclinações no grafeno já foram estudadas via modelo de tight-binding nas referências: [110, 111, 112]. E pelo modo *ab initio* nas referências: [113, 114]. Vale ainda pontuar que dipolos tipo pentágono-heptágono também já foram observados em estruturas de grafeno (Fig. 2.4).

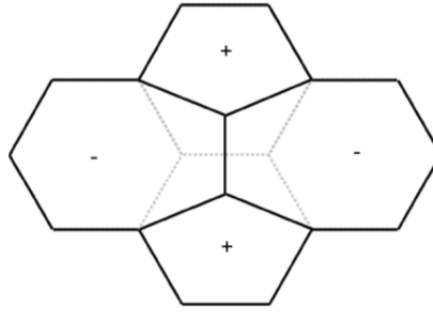


Figura 2.4 Dipolos pentágono-heptágono, ou par de Stone-Wales [115].

Conhecidos como pares de Stone-Wales. Que acabam agindo como deslocções no meio [116, 117, 118]. Bem como também foram observados defeitos pontuais de forma isolada em [119, 120, 121, 122]. No grafeno a deslocção mais comum é a formação de um par de Stone-Wales. Sua estabilidade foi estudada em [123, 124, 125].

Na presença de defeitos, como desclinações (pentágonos e heptágonos) ou deslocções (pares de Stone-Wales), a própria topologia da rede de grafeno é alterada. Ou seja, as propriedades globais da rede são alteradas. No entanto a equação de Dirac efetiva ainda pode ser definida localmente. De fato, o que os defeitos topológicos fazem é modificar os graus de liberdade internos do spinor dos portadores de carga ao notarem os defeitos no meio. Mudança essa que, como veremos na seção que segue, é mediada por campos de gauge.

2.4 Campos de Gauge:

O próprio conceito de invariância de gauge surgiu da eletrodinâmica, garantindo que uma partícula carregada interaja com o campo eletromagnético pelo acoplamento: $p_\mu \rightarrow p_\mu - eA_\mu$. As simetrias de gauge são de tal importância para a Física que, além de introduzir a interação na lagrangeana de um dado sistema, também determinam o parâmetro de interação das partículas no modelo. Ou novos números quânticos. Que no caso da eletrodinâmica quântica (QED) é a carga elétrica. Tanto o campo spinorial, quanto sua derivada covariante transformam-se sob um dado grupo de simetria local (com geradores τ_k) por:

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp[i\vec{\tau} \cdot \vec{\xi}(x)]\psi(x), \quad (2.45)$$

$$D_\mu \psi(x) \rightarrow D'_\mu \psi'(x) = \exp[i\vec{\tau} \cdot \vec{\xi}(x)]D_\mu \psi(x), \quad (2.46)$$

Onde $\xi(x)$ é uma fase dependente das coordenadas, introduzida nos trabalhos de Yang-Mills [126, 127]. Perceba que na QED o grupo de simetria é o $U(1)$. Que é um grupo Abelian. Contudo, ao tratarmos simetrias de gauge não-Abelianas, diversos resultados importantes surgem na Física. Tanto nas interações fracas, como na cromodinâmica quântica (QCD), os grupos de simetria são não-Abelianos [128].

Na linguagem da geometria diferencial os campos de gauge são descritos por formas diferenciais. Ou seja, o campo de gauge é a conexão usada para construir derivadas covariantes agindo nos campos. A conexão de gauge gera um transporte paralelo dos objetos da geometria sob as transformações de gauge. De fato, a própria relatividade geral pode também ser interpretada como uma teoria de gauge. Onde a invariância de gauge é revelada por difeomorfismos na variedade do espaço-tempo.

Na presença de defeitos do tipo desclinação, por exemplo, o fluxo de gauge é ajustado a fase adquirida pelo spinor ao circundar o defeito. Sendo assim a fase tem um fluxo análogo ao efeito Aharonov-Bohm [129, 115]:

$$\int \vec{A} \cdot d\vec{r} = 2\pi\alpha = 2\pi \left(1 \pm \frac{\lambda}{2\pi} \right). \quad (2.47)$$

Sendo λ o parâmetro que caracteriza o setor de déficit ou superavit no defeito.

Note no entanto, que na rede de grafeno a baixas energias o espectro provém de uma equação de Dirac efetiva para um dubleto de spinores acoplados. E que na região do defeito temos o ponto de Fermi K indo em K' no espaço dos momentos (Fig. 2.5):

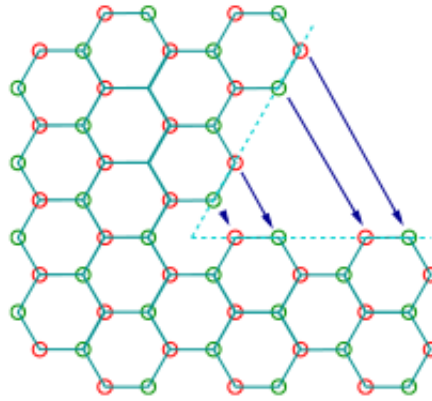


Figura 2.5 Conexão das sub-redes por uma desclinação positiva [44].

Temos então o surgimento de mais um número quântico associado a cada sub-rede. Que juntas compõem um dubleto por $SU(2)$. Isto é, no limite do contínuo as descontinuidades das sub-redes são descritas por campos de gauge fictícios relacionados a fase obtida no transporte paralelo do spinor; bem como também a própria variação do referencial local no entorno do defeito tem um gauge associado.

Sabemos que as componentes do spinor da quasipartícula no espaço de K-spin são invariantes sob rotações. E essa covariância na rotação implica que no grafeno elétrons a baixas energias tem um número quântico de momento angular intrínseco. Usando campos de gauge nós promovemos a covariância por rotações no espaço do K-spin a invariância sob simetrias locais. Que é o equivalente a promover um acoplamento mínimo de gauge relativo a interação provocada pela mistura dos graus de liberdade do pseudo-spin na rede de grafeno.

No caso de desclinações a mistura das componentes do spinor é descrita por um gauge não-Abeliano, tão somente dependente da topologia da rede, dado por [130]:

$$\oint_{\gamma} A_{\mu} dx^{\mu} = \frac{\pi}{2} \tau_2. \quad (2.48)$$

Ainda vale salientar que, para preservar a simetria de reversão temporal, o campo deve ser tal que $A_K = -A_{K'}$. E que a matriz de Pauli τ_2 age somente no K-espaço [131].

Dando prosseguimento, é imperativo lembrar que na abordagem geometrica haverá também uma variação do referencial local na região do defeito. Tal variação também pode ser encarada como um fluxo de gauge induzido pela curvatura no ponto. Descrito pela circulação da conexão de um-forma:

$$\oint_{\gamma} \omega_{\mu} dx^{\mu} = -\frac{\pi}{6} \sigma_3. \quad (2.49)$$

Aqui vale denotar que no estudo de deslocações outros gauges surgirão. Todavia, não é do

escopo dessa tese o estudo de gauges induzidos por torções. Uma referência muito explicativa sobre o tema é [132]. Bem como sobre o estudo de fases geométricas na presença de torção em: [134].

Também vale comentar que os gauges associados aos defeitos em modelos do contínuo se estendem a longas distâncias no meio, uma vez que não dependem da distância do circuito (γ) que contorna o ápice (Fig. 2.6):

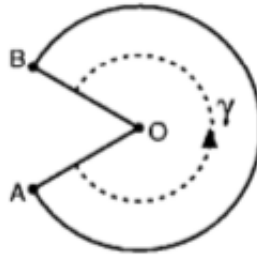


Figura 2.6 Exemplo de contorno numa desclinação positiva conectando as sub-redes [130].

De tal modo que, além de elucidarem uma física de longa distância. Que é improvável, ou de difícil acesso para calculos de primeiros princípios. Promovem a extensão do modelo para N defeitos [133].

Deremos prosseguimento no capítulo que segue a abordagem via campos de gauge para defeitos. Agora estudando um dos subprodutos da matriz de grafeno: o fullereno.

Molécula de fulereno na presença de um fluxo tipo Aharonov-Bohm

Nesse capítulo vamos rever brevemente algumas abordagens chave para a modelagem do fulereno C_{60} . Primeiramente discutiremos algumas dessas abordagens no limite do contínuo, dando um panorama dos modelos que escrevem o espectro da molécula com simetria icosaédrica. Dando prosseguimento ao texto, vamos descrever um dos trabalhos que serviram como resultado dessa tese [22]. Nele construímos um modelo do contínuo para a molécula de fulereno C_{60} submetida a ação de um fluxo de Aharonov-Bohm atravessando a molécula. Obtemos então o espectro, bem como predizemos a existência de corrente persistente no sistema. Ambos para uma abordagem sob a ótica de um sistema de referência inercial esfericamente simétrico. Recuperando também outros resultados da literatura em seus casos específicos.

3.1 Introdução:

Como comentamos no capítulo 1, Kroto, Curl e Smalley foram laureados em 1996 com o prêmio Nobel de Química pela descoberta de um novo alótropo do carbono: o fulereno C_{60} [4]. Nessa molécula os átomos estão arranajados numa casca esférica fechada composta por 20 (vinte) anéis hexagonais e por 12 (doze) anéis pentagonais.

Por tratarem-se de um subproduto da matriz de grafeno, a menos dos doze defeitos tipo desclinação; representados pelos anéis pentagonais. Podemos supor uma extensão do modelo de tight-binding usado no grafeno; bem como que é possível descrever, a baixas energias, os portadores de carga em sua superfície por férmions de Dirac não-massivos provenientes de uma equação de Dirac efetiva. Reduzindo a superfície de Fermi a apenas dois pontos (K e K') localizados na primeira zona de Brillouin.

É cabível ver que a presença dos doze anéis pentagonais presentes na molécula do fulereno C_{60} designam a existência de defeitos topológicos no meio. Uma vez que a estrutura hexagonal basilar não se estende sobre toda a extensão do material. Tais defeitos são gerados do ponto de vista conceitual, por processos de "cortar e colar" de Volterra [107].

Aqui ainda vale notar que, embora existam outras classes de fulerenos, variando tanto o número de átomos de carbono, quanto o número de camadas [70], o intento dessa tese é tratar

a forma mais abundante: o fulereno C_{60} . Contudo, sabendo que tanto o C_{60} , quanto o C_{240} e o C_{540} tem doze pentágonos, colocados sempre nas mesmas posições relativas [135, 136, 137] (Ver Figuras 3.1, 3.2 e 3.3), podemos estender o estudo dessa classe de fulerenos. Que denominaremos a classe dos fulerenos C_{60} :

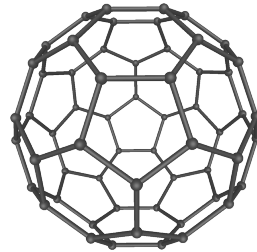


Figura 3.1 Figura do Fulerno C_{60} [138].

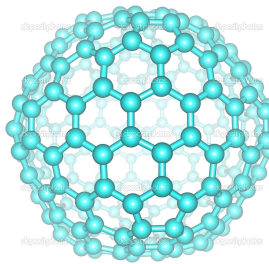


Figura 3.2 Figura do Fulerno C_{240} [138].

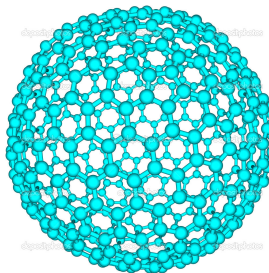


Figura 3.3 Figura do Fulerno C_{540} [138].

Diferente de estruturas cristalinas tridimensionais, onde defeitos do tipo deslocamentos são energeticamente mais favoráveis. Em estruturas bidimensionais, mais especificamente no grafeno e seus derivados (fulerenos e nanotubos,...), são as desclinações os defeitos mais relevantes. Efeitos físicos de desclinações no grafeno tem sido extensivamente estudados recentemente. O estudo de fases geométricas em cones de grafeno nas referências: [133, 139]. Níveis de Landau também foram bem descritos em: [140]. A abordagem de defeitos topológicos em folhas de

grafeno via a teoria de Kaluza-Klein em: [141]. Bem como o estudo de computação quântica holonômica associada a defeitos do grafeno em: [142, 143, 144].

3.2 Modelos do contínuo para o Fulereno:

Na descrição da classe de fulerenos existem diversas formulações teóricas, experimentais e computacionais que tentam obter informações sobre tais moléculas. Por exemplo, um interessante estudo sobre a condutividade elétrica, propriedades magnéticas e fotocondutividade em fulerenos foi exposto por Gensterblum em: [145]. Bem como já houveram abordagens da molécula segundo os modelos de: gás de elétrons livres [146], tight-binding [147, 148, 149, 150], e via calculos *ab initio* da química [151]. No entanto tais abordagens estão mais direcionadas ao estudo do acoplamento elétron-fônon no fulereno. E não explicitam o espectro eletrônico dos portadores de carga na rede.

No estudo da classe dos fulerenos C_{60} existe uma formulação particularmente interessante. Isso porque se notarmos a estrutura geométrica de um dos sólidos platônicos ¹ o icosaedro (Ver Fig. 3.4); veremos que o mesmo é um poliedro convexo de 20 (vinte) faces, constituído por 20

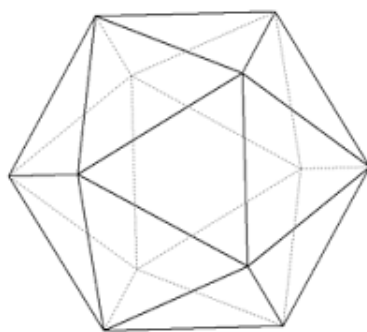


Figura 3.4 Figura do Icosaedro [152].

(vinte) triângulos equiláteros. Ele contém 30 (trinta) arestas e 12 (doze) vértices.

Pois bem, a formulação consiste em descrever a classe de C_{60} assumindo que os defeitos pentagonais necessários para o fechamento da "bola" podem ser descritos pelos vértices do icosaedro. Essa idéia foi primeiramente proposta por González, Guinea e Vozmediano [15]. Onde os autores assumem que o C_{60} possui a mesma simetria de grupo do icosaedro (Ver também [149]).

¹Para maiores detalhes sobre os sólidos Platônicos ver o Apêndice B.

Observe que, para que a forma geométrica do icosaedro se assemelhe ao C_{60} , podemos assumir a estrutura das vinte faces do poliedro como na figura (3.5) abaixo:

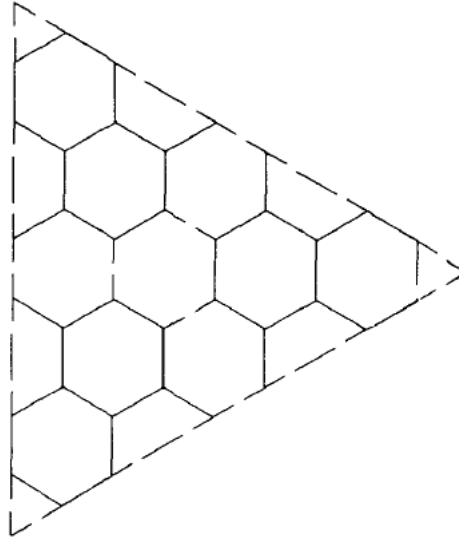


Figura 3.5 Face do Icosaedro para o C_{60} [15].

De fato, os pedaços triangulares da figura (3.5) podem também construir outros tipos de rede como o tetraedro (Ver Fig. 3.6):

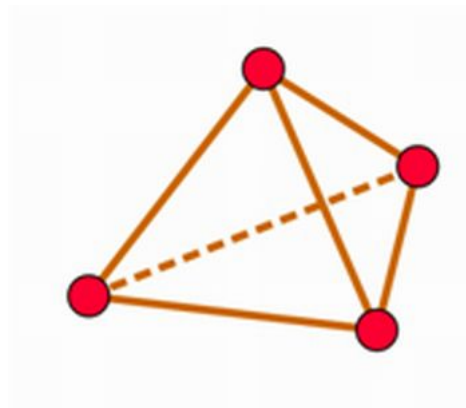


Figura 3.6 Figura do Tetraedro [153].

E o octaedro (Ver Fig. 3.7):

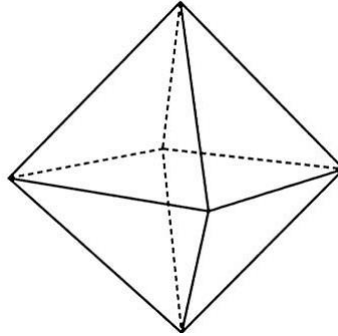


Figura 3.7 Figura do Octaedro [154].

Preservando o grupo de simetria de tais poliedros. Que podem estender o modelo a outras estruturas moleculares com número e características de defeitos distintos.

Dentro da conjuntura do modelo, nota-se que as condições de contorno das funções de onda sob a rede favo-de-mel inscrita nos poliedros - tanto o icosaedro, como o tetraedro e o icosaedro - exibem; assim como no caso plano, dois pontos de Fermi distintos [15]. Mostrando que a relação de dispersão linear permanece inalterada na rede "curvada". Ou seja, é razoável usar a teoria quântica de campos em espaços curvos como pano de fundo para descrever, no limite do contínuo, a rede inscrita no icosaedro.

Note que no grafeno, no limite do contínuo, as propriedades eletrônicas da rede são bem descritas por uma equação de Dirac efetiva em 2+1 dimensões (duas espaciais e uma temporal). Bem como as propriedades elásticas são bem descritas pela própria teoria da elasticidade. No caso do C_{60} , as degenerescências induzidas pelas condições de contorno da molécula sob a rede resultam no aparecimento de uma fase de Berry na quantização dos graus de liberdade da rede na região dos defeitos. E assim o dubleto de spinores adquire uma fase quando circunda o pentágono (ou defeito). Resultando, ao considerar a molécula muito "larga", numa curvatura intrínseca da rede acumulada nos pentágonos. De fato, tais propriedades podem ser reproduzidas por um fluxo magnético efetivo em cada defeito. E tal situação pode ser mimetizada por um monopolo magnético de t'Hooft-Polyakov [16, 17] fictício no centro do poliedro. Ou seja, a descrição da estrutura eletrônica do material é dada por uma equação de Dirac efetiva com um campo de monopolo inscrito sob a rede.

Do ponto de vista do espaço dos momentos, a rotação no espaço do pseudo-spin (K-space) provoca a mistura dos pontos K , que é descrita pela linha de fluxo magnético em cada defeito. Esse fluxo é não-Abeliano e é ajustado a fase obtida em torno do defeito. Bem como, uma vez que os graus de liberdade são dubletos por $SU(2)$, o campo pode ser descrito por [45]:

$$A = A^{(a)}\tau^{(a)}, \quad a = 1, 2, 3. \quad (3.1)$$

Quando escrita em coordenadas polares, a única componente não-nula em torno do defeito é:

$$A_\phi = \frac{\Phi}{2\pi}\tau^{(2)}. \quad (3.2)$$

E a carga do monopolo é obtida somando o fluxo sob os defeitos. Ou seja:

$$g = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \Phi = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \frac{\pi}{2} = \frac{N}{8} = \frac{12}{8} = \frac{3}{2}. \quad (3.3)$$

Onde $\Phi = \frac{\pi}{2}$ é a fase adquirida pelo dubleto a fim de contornar a singularidade cônica no modelo:

$$e^{i\oint A} = \left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] \tau^{(2)} = i\tau^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Invertendo assim os números quânticos relativos aos graus de liberdade no K-espaço:

$$e^{i\oint A} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_- \\ -\psi_+ \end{pmatrix}; \quad (3.5)$$

e garantindo que: $\psi(\phi + 2\pi) = -\psi(\phi)$.

Note, que nessa aproximação, é possível que tanto a curvatura quanto o fluxo do monopolo sejam contantes sob a rede. Fazendo com que o dubleto interaja tanto com a curvatura quanto com o monopolo.

As quasipartículas do modelo interagem com a curvatura por meio da conexão spinorial ($\Gamma_\mu(x)$); que constrói a derivada covariante do spinor. Também, a interação devido a mistura dos pontos de Fermi em torno dos defeitos; ou seja, a interação com os defeitos; é mediada por um campo de gauge não-Abeliano que simula um monopolo magnético fictício no centro da molécula.

Uma vez que a relação de dispersão linear permanece inalterada na rede inscrita no poliedro, a interação dos portadores de carga com a rede é descrita, a baixas energias, por uma equação de Dirac efetiva. Onde as interações com a curvatura e com o monopolo vêm de um acoplamento de gauge na derivada covariante.

Sabemos ainda que, para a situação onde temos spinores com duas componentes, as matrizes de Dirac do sistema podem ser representadas por matrizes de Pauli [18, 155]. Desse modo a equação de Dirac efetiva para o modelo é dada por:

$$-i\sigma^a E^\mu_a (\partial_\mu - \Gamma_\mu - iA_\mu)\psi_n = \varepsilon_n \psi_n, \quad a, \mu = 1, 2. \quad (3.6)$$

Que, escrito em coordenadas esféricas, temos apenas como termos não-nulos: $A_\phi = g \cos \theta \tau^{(2)}$ e $\Gamma_\phi = \frac{1}{4}[\sigma^1, \sigma^2] \cos \theta$.

Mais adiante retomaremos com mais detalhes como obter as componentes supracitadas, bem como as componentes da tetrada inversa (E^μ_a). Já levando em conta a proposta dessa tese sobre a rede inscrita no icosaedro. Aqui é importante pontuar que no trabalho de González, Guinea e Vozmediano [15], o operador de Dirac é diagonalizado via construção de operadores de momento angular:

$$J_\pm = \pm e^{\pm i\phi} \partial_\theta + i e^{\pm i\phi} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \left(\partial_\phi - \frac{1}{4}[\sigma^1, \sigma^2] \cos \theta - i g \cos \theta \tau^{(2)} \right) - e^{\pm i\phi} \sin \theta \left(\frac{1}{2} - g \tau^{(2)} \right), \quad (3.7)$$

e:

$$J_z = -i \left(\partial_\phi - \frac{1}{4}[\sigma^1, \sigma^2] \cos \theta - i g \cos \theta \tau^{(2)} \right) - \cos \theta \left(\frac{1}{2} - g \tau^{(2)} \right). \quad (3.8)$$

De modo que, como: $J^2 \psi_n = j(j+1) \psi_n$ e $J^2 = J_\pm J_\mp + J_z^2 \mp J_z$. Após um pouco de algebrismo, temos:

$$\left(J^2 + \frac{1}{4} - g^2 \right) \psi_n = \epsilon_n^2 r^2 \psi_n. \quad (3.9)$$

Sendo r o raio da *buckyball*. Assim, resolvendo a equação de autovalores, encontramos:

$$\epsilon_j = \pm \frac{1}{r} \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - g^2}, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.10)$$

Vale aqui ressaltar que essa não é a única abordagem sobre o fulereno com simetria icosaédrica (ou Ih symmetry). De fato a abordagem de González, Guinea e Vozmediano [15] foi a primeira abordagem do contínuo para a molécula. Contudo, um trabalho de Osipov em 1992 [19] destacou a existência de um campo de gauge elástico W_μ agindo também no cone de grafeno. Campo esse que não havia sido considerado no trabalho [15]. O campo é tal que:

$$\oint W_\mu dx^\mu = \frac{\pi}{3}. \quad (3.11)$$

Como podemos observar é um campo Abelianiano. E que, como a própria referência [19] descreve, dá a origem topológica da desclinação. Combinando assim os efeitos da curvatura e da elasticidade. O que é interessante notar aqui é que o campo elástico da equação (3.11) entra na derivada covariante, alterando a equação de Dirac. De modo que:

$$-i \sigma^a E^\mu_a (\partial_\mu - \Gamma_\mu - i A_\mu - i W_\mu) \psi_n = \epsilon_n \psi_n, \quad a, \mu = 1, 2. \quad (3.12)$$

Onde, escrito em coordenadas esféricas, também temos apenas como termo não-nulo a componente: $W_\phi = -\cos\theta$. E também Osipov, juntamente com Kolesnikov, estabelecem o desenrolar algébrico do problema proposto com o campo de gauge elástico (W_ϕ). Obtendo um espectro para as quasipartículas referentes ao campo fermiônico de spin $\frac{1}{2}$, com um novo número quântico n . Dado por [18, 20]:

$$E_n = \sqrt{\left(n + |m| + \frac{1}{2}\right)^2 - G^2}, \quad m = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots; n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.13)$$

Onde a carga G é reparametrizada por:

$$G = \pm \frac{(A_\phi + W_\phi)}{\cos\theta} = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots \quad (3.14)$$

Na obtenção do espectro do C_{60} , uma outra abordagem é de especial relevância. Trata-se do trabalho de Imura, Yoshimura, Takane e Fukui [21]. Onde os autores estabelecem uma relação explícita entre o Hamiltoniano do *bulk* (superfície) de um isolante topológico com simetria esférica tridimensional e um operador de Dirac efetivo sob uma superfície curva esférica. Ou seja, a teoria de Dirac é derivada do Hamiltoniano do *bulk*. Permitindo corrente apenas no *bulk*.

Nessa abordagem o termo que reporta a fase de Berry no defeito provêm da própria covariância das derivadas, na direção polar (θ) e azimutal (ϕ), sobre o espaço curvo do isolante topológico esférico. E o espectro é derivado também em termos da componente z do momento angular orbital:

$$E_{n,m} = \pm \frac{1}{r} \sqrt{\left(n + |m| + \frac{1}{2}\right)^2}, \quad m = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots; n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

De fato, não é o objetivo dessa seção transcorrer com detalhes o enredo detalhado das referências [15, 18, 19, 20, 21]. Tendo em vista que muitas questões levantadas sobre abordagens do contínuo para a molécula de fulereno serão retomadas na seção que segue. Vamos agora nos ater a abordagem para o fulereno com simetria icosaédrica num referencial inercial. Segundo um dos trabalhos resultantes dessa tese [22]. E, durante o texto, comentaremos como os resultados do modelo proposto recuperam as referências supracitadas em suas dadas situações.

3.3 Fulereno sob fluxo de Aharonov-Bohm:

Como vimos um spinor na rede do fulereno com simetria icosaédrica interage com a curvatura do espaço e com o monopolo via acoplamento de gauge. Nesse contexto a superfície de Fermi também se reduz a dois pontos K independentes localizados na primeira zona de Brillouin. Estabelecendo um preenchimento da banda de valência e, conseqüentemente, a possibilidade de separarmos as componentes do spinor num dubleto ($\psi^\pm$) condizente com os pontos $K_\pm$.

Na conjuntura do nosso modelo utilizamos a métrica de uma esfera bidimensional sob um sistema de referência inercial. Ou seja, assumimos o mapeamento da molécula de fulereno com simetria icosaédrica num espaço-tempo com duas dimensões espaciais e uma temporal, com simetria esférica, induzido pela presença de defeitos do tipo desclinação. Assim temos uma curvatura do espaço não-nula ($R_{\mu\nu} \neq 0$), porém sem torção ($T_{\mu\nu} = 0$). Nesse arcabouço teórico resolvemos a equação de Dirac efetiva sob essa geometria esférica com defeitos topológicos sob o *background* de uma corda magnética chiral. Ou seja, assumimos um fluxo magnético Φ_B , como uma espécie de arame magnético, transpassando a esfera de pólo a pólo. Onde o dubleto interage com a curvatura característica, com os campos magnéticos mimitizados pelo monopolo, acumulados nas singularidades cônicas dos defeitos; bem como com gauge característico do arame magnético. Encontrando assim, como uma das contribuições originais da tese [22], a predição de corrente persistente no sistema.

Podemos então pensar numa métrica de uma esfera bidimensional com um defeito do tipo desclinação:

$$ds^2 = dt^2 - r^2 d\theta^2 - \alpha^2 r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \quad (3.16)$$

onde o parâmetro:

$$\alpha = 1 \pm \frac{\lambda}{2\pi}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (3.17)$$

descreve o setor angular λ removido da superfície esférica (Ver Fig. 3.8):

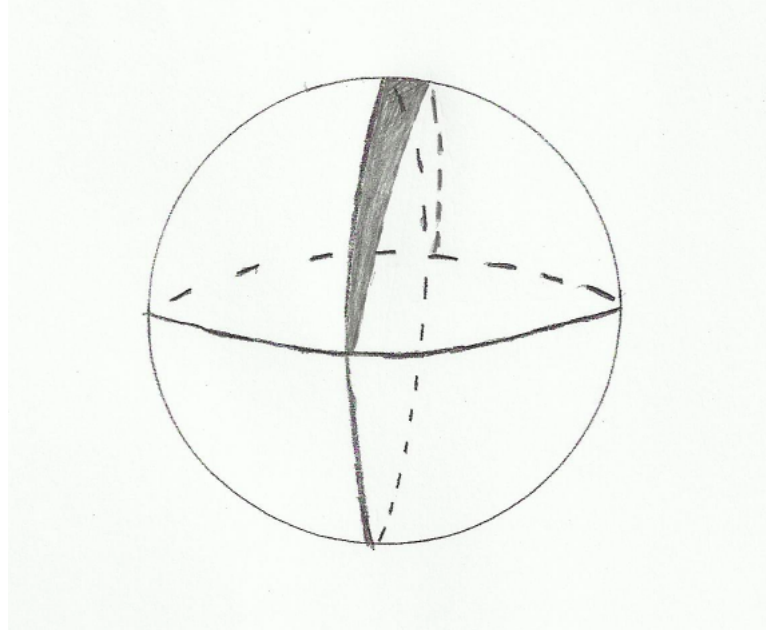


Figura 3.8 Superfície Esférica com setor α removido.

Ou seja, podemos pensar na esfera com defeitos como a mesma tendo um dos "gomos" retirados. De modo parecido com uma tangerina. Assim ela assume um formato oval, típico de uma bola de futebol americano. Tendo a coordenada ϕ agora indo de 0 a $2\pi\alpha$. Caso assumíssemos $\alpha > 1$, teríamos um dos "gomos" acrescentado a tangerina (esfera).

Aqui é interessante discutir que, a baixas energias, as autofunções não oscilam tão rapidamente com a distância as singularidades cônicas [20]. De modo que a aproximação do monopolo é válida para pequenos números quânticos. Ou seja, próximo ao ponto de Fermi. O que retrata na verdade a aproximação para a descrição, sob uma equação de Dirac efetiva, dos portadores de carga sob rede. Podemos então assumir a influência dos doze pentágonos no fullereno pela métrica efetiva da equação (3.16). Adotando assim que toda a nossa abordagem funcione muito bem nas proximidades do defeito. Bem como, vale ainda ressaltar, que o parâmetro α é um parâmetro puramente geométrico, não sendo proveniente de simetrias de gauge. Sendo essa a essência do trabalho desenvolvido em [22]. Ou seja, vamos descrever a dinâmica do fullereno nas proximidades das singularidades cônicas por meio da métrica da esfera com defeitos descrita em (3.16). Obtendo, e resolvendo, a equação de Dirac efetiva no espaço curvo esférico.

Na escolha da base de tetradas $\theta^a = e^a_\mu(x)dx^\mu$ assumimos a matriz de tetradas diagonal:

$$e^a_\mu(x) = \begin{pmatrix} e^0_t & e^0_\theta & e^0_\phi \\ e^1_t & e^1_\theta & e^1_\phi \\ e^2_t & e^2_\theta & e^2_\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & \alpha r \sin \theta \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Para que possamos escrever os acoplamentos de gauge na equação de Dirac, é necessário obter a conexão spinorial :

$$\Gamma_\mu(x) = \frac{i}{4} \omega_{\mu ab} \Sigma^{ab}. \quad (3.19)$$

Lembrando que Σ^{ab} é dada pela equação (2.31). Que pode ser escrita em termos das matrizes de Pauli ($\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}$) [18, 156]. Onde $\gamma^a = \sigma^a$ e $\sigma^0 = 1$. De tal modo que:

$$\Gamma_\mu(x) = -\frac{1}{8} \omega_{\mu ab} [\sigma^a, \sigma^b]. \quad (3.20)$$

Já para encontrarmos as conexões de um-forma, recorremos a primeira das equações de estrutura de Maurer-Cartan (eq. 2.24) para o caso sem torção [97, 98, 99]:

$$d\theta^a + \omega^a_b \wedge \theta^b = 0. \quad (3.21)$$

Obtemos então duas contribuições não-nulas para a conexão de um-forma na métrica (3.16):

$$\omega_\phi^2_1 = -\omega_\phi^1_2 = \alpha \cos \theta. \quad (3.22)$$

De modo que a conexão spinorial fica:

$$\Gamma_\phi(x) = \frac{i}{2}\alpha \cos \theta \sigma_3. \quad (3.23)$$

Como havíamos discutido, a dinâmica quântica das quasipartículas no fulereno a baixas energias, é bem descrita pela equação de Dirac em espaços curvos. Com as interações com a curvatura e com o monopolo entrando como acoplamentos de gauge:

$$-i\sigma^a E_a^\mu (\partial_\mu - \Gamma_\mu - iqA_\mu)\psi = \frac{\varepsilon}{\hbar V_f}\psi. \quad (3.24)$$

Sendo V_f a velocidade de Fermi dos portadores de carga no meio, e q a carga das quasipartículas no meio.

Ainda, como é bem sabido que, em coordenadas esféricas, temos apenas a componente $A_\phi = g \cos \tau^{(2)}$. Bem como que a conexão spinorial é obtida da equação (3.23). É importante notar que $\tau^{(2)}$ age somente no espaço dos momentos. Enquanto que σ^a age somente sob a geometria. Assim, como tais matrizes operam sob diferentes subespaços, é possível desacoplarmos as componentes do dubleto por uma rotação conveniente sob campo do monopolo. Levando assim a equação a uma base onde $\tau^{(2)}$ seja diagonal. Para isso fazemos:

$$\oint A_\mu^{Rot.} dx^\mu = A_\phi^{Rot.} = U^\dagger A_\phi U = A_\phi^k = \begin{cases} g \cos \theta, & \text{se } k = (+) \\ -g \cos \theta, & \text{se } k = (-) \end{cases}; \quad (3.25)$$

onde:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Assim a equação (3.24) fica reduzida a temática de uma equação de autovalores sob a esfera:

$$-i\sigma^a E_a^\mu (\partial_\mu - \Gamma_\mu - iqA_\mu^k)\psi^k = \frac{\varepsilon}{\hbar V_f}\psi^k, \quad (3.27)$$

com a tetrada inversa $E_a^\mu = \eta_{ab} g^{\mu\nu} e^b_\nu$ escrita por:

$$E_a^\mu(x) = \begin{pmatrix} E^t_0 & E^t_1 & E^t_2 \\ E^\theta_0 & E^\theta_1 & E^\theta_2 \\ E^\phi_0 & E^\phi_1 & E^\phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\alpha r \sin \theta} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Vamos então estudar o cenário em que a molécula de fulereno encontra-se na presença de um fluxo magnético de Aharonov-Bohm (Φ_B) proveniente de uma corda magnética quiral como *background*, que atravessa a molécula do polo norte ao polo sul da esfera. Esse contexto é o mesmo que estudarmos o fulereno C_{60} sob a influência de um campo magnético $B_z =$

$\Phi_B \delta(r)$. Que está associado a um potencial vetor, que no referencial local $A^a = e^a_\mu(x) A^\mu$ é dado por² [157, 158, 159]:

$$A_{\phi, MS} = \frac{\Phi_B}{2\pi}. \quad (3.29)$$

O potencial vetor da equação (3.29) também entra na equação (3.27) como um acoplamento de gauge. De tal modo que se assumirmos:

$$\lambda = \frac{\epsilon R}{\hbar V_f}, \quad (3.30)$$

$$\tilde{\partial}_\theta = \partial_\theta + \frac{\cot \theta}{2}, \quad (3.31)$$

e:

$$\tilde{\partial}_\phi^k = \partial_\phi - i \frac{\Phi_B}{2\pi} - i q A_\phi^k. \quad (3.32)$$

A equação de Dirac (3.27) para a rede fica:

$$\left(\sigma_1 \tilde{\partial}_\theta + \sigma_2 \frac{\tilde{\partial}_\phi^k}{\alpha \sin \theta} \right) \psi^k = i \lambda \psi^k. \quad (3.33)$$

Onde R é o raio da casca esferica que descreve a molécula.

3.4 Espectro e Corrente Persistente:

Para que possamos obter o espectro dos portadores de carga sob a rede, segundo a aproximação da métrica (3.16), e com o *background* da corda magnética quiral, devemos resolver o problema de autovalores na equação (3.33). Também, devido a invariância sob rotações no K -espaço das componentes do dubleto implicar num momento angular intrínseco a tais componentes [130], podemos; com fins de simplificar o algebrismo imposto, promover um *ansatz*:

$$\psi^k(\theta, \phi) = e^{im\phi} \psi_m^k(\theta), \quad (3.34)$$

na componente do dubleto. De modo que a equação (3.33) fique:

$$\left[\frac{d}{d\theta} + \left(\frac{1}{2} + k \frac{g}{\alpha} \right) \cot \theta - \frac{k}{\alpha \sin \theta} \left(m - \frac{q \Phi_B}{2\pi} \right) \right] \psi_m^{(k)} = i \lambda \psi_m^{(-k)}. \quad (3.35)$$

²Observe que a mudança para o referencial local é dada de acordo com a base de tetrada da referência [157] (Ver. eq. (7)). Também é importante salientar que o sinal positivo na equação (3.29) deve-se ao sinal positivo na definição do campo magnético: $B_z = \Phi_B \delta(r)$.

Note que aqui, por tratarmos de um campo fermiônico de spin $\frac{1}{2}$, temos: $m = j + \frac{1}{2}$, com $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e $m = 0, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$. Também, é possível observar que para $g = \Phi_B = 0$ e $\alpha = 1$ recuperamos as respectivas abordagens das referências [18, 21]. Do mesmo modo, quando $\alpha = 1$, $\Phi_B = 0$. Ainda, considerando unidades naturais: $\hbar = V_f = R = 1$, e com a devida adequação dos números quânticos, recuperamos também as referências [19, 20]. Isso sem a necessidade de reparametrizarmos a carga do monopolo, como feito na equação (3.14). Ou seja, ao assumirmos que o modelo da métrica (3.16) com defeitos [22] é bem descrito nas proximidades do defeito, já não existe a necessidade do campo elástico proposto em [19].

Dando prosseguimento, a equação (3.35) nos dá na verdade um conjunto de duas equações para $\psi_m^\pm$. Que combinadas nos dão como resultado a seguinte equação diferencial:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \frac{\cos \theta}{\alpha} + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right\} \psi_m^k = 0. \quad (3.36)$$

Como estamos em busca do espectro dos portadores de carga na molécula de fulereno, é natural que procuremos explicitar o termo λ (Ver eq. (3.30)). Podemos então realizar uma mudança de coordenadas conveniente a fim de levar a equação (3.36) num outro tipo de equação diferencial com propriedades gerais já bem estabelecidas. Na referência [18] o autor realiza a mudança $\zeta = \cos \theta$ em seu problema; convertendo sua EDO numa equação de Jacobi [160], [161]. Ao realizarmos tal mudança de coordenadas, encontramos:

$$\left\{ (1 - \zeta^2) \frac{d^2}{d\zeta^2} - 2\zeta \frac{d}{d\zeta} - \frac{1}{1 - \zeta^2} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \zeta + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right\} \psi_m^k = 0. \quad (3.37)$$

Observe que os polós do limite assintótico são agora: $\zeta = \cos \theta$, $\zeta \in [-1, 1]$. No entanto, em nosso trabalho fruto dessa tese: [22], podemos ainda modificar os pólos do limite assintótico para: $x = \frac{1+\zeta}{2}$, $x \in [0, 1]$. Desse modo é possível obter uma EDO muito próxima de uma EDO hipergeométrica:

$$\left\{ x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + (1-2x) \frac{d}{dx} - \frac{1}{4x(1-x)} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right)^2 + \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) (1-2x) + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right\} \psi_m^k = 0. \quad (3.38)$$

Baseado nos pólos obtidos nos limites assintóticos é possível obter um *ansatz*:

$$\Psi_m^k = x^{C_+}(1-x)^{C_-} H_m^k(x), \quad (3.39)$$

com:

$$C_{\pm} = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \pm \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right|. \quad (3.40)$$

Que torna-se conveniente por levar a equação (3.38) numa equação com a estrutura de uma hipergeométrica confluyente:

$$\begin{aligned} & \left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \left\{ \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right| + 1 - 2 \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) x \right\} \frac{d}{dx} + \right. \\ & \left. - \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right] H_m^k(x) = 0. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Garantindo assim a finitude da função de onda. Ainda, ao compararmos a equação (3.41) com a equação padrão para uma hipergeométrica:

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \{ \mu + 1 - (\mu + \nu + 2)x \} \frac{d}{dx} + n(n + \mu + \nu + 1) \right] F(A, B, C, x) = 0, \quad (3.42)$$

podemos identificar os parâmetros:

$$\mu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right|, \quad (3.43)$$

e:

$$\nu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) - \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right|. \quad (3.44)$$

Bem como, comparando as equações (3.41) e (3.42), obtemos:

$$\lambda^2 = n \left(n + 2 \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) + \frac{1}{4} - \frac{g^2}{\alpha^2}. \quad (3.45)$$

Que resulta no espectro das quasipartículas na molécula de fulereno segundo a abordagem geométrica da esfera bidimensional [22]:

$$\varepsilon_{n,m} = \pm \frac{\hbar V_f}{R} \sqrt{\left[\left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{g^2}{\alpha^2} \right]}. \quad (3.46)$$

Aqui podemos observar que em (3.46) temos $\varepsilon_{n,m}$ inversamente proporcional a R , entretanto sem alterar a distância entre os níveis. Bem como que o fluxo Φ_B provoca um desvio (*shift*) na

componente z do momento angular. Também, quando assumimos $\alpha = 1$ e $\Phi_B = 0$, recuperamos, com as devidas adequações já descritas acima, os resultados das referências: [18, 19, 20, 21].

O fato de obtermos um espectro dependente do fluxo magnético (Φ_B) da corda magnética quiral sugere ainda a existência de uma corrente persistente sob a molécula de fulereno C_{60} . Conceito esse obtido primeiramente no contexto da supercondutividade [162, 163, 164]. Sendo um efeito puramente quântico.

De fato, correntes persistentes foram observadas primeiramente em anéis supercondutores [164, 165] ao se estudar a transição da fase condutora para a fase supercondutora ($T \rightarrow T_c$, $T > T_c$) dos mesmos sob a influência de um fluxo magnético externo. Sendo T_c a temperatura crítica do supercondutor.

Observou-se assim que, na fase supercondutora $T < T_c$, mesmo eliminando o campo magnético externo, uma corrente residual superficial permanece sob o supercondutor. Tendo essa corrente um sentido oposto ao da variação do fluxo magnético externo. De modo similar ao que acontece na lei de Lenz. Entretanto, diferentemente da corrente do caso clássico descrito por Lenz, a corrente residual permanece na fase supercondutora, mesmo sem o campo externo. Por isso a denominação de corrente persistente. No entanto, correntes persistentes não são um efeito somente de supercondutores, podendo existir em materiais condutores normais. No caso de anéis, por exemplo, quando existe um fluxo magnético passando na região central do anel. Tais correntes não diminuem por efeitos de dissipação, podendo fluir por um longo período. Nesse trabalho estamos interessados em correntes persistentes geradas pela variação do fluxo Φ_B provocado pela corda magnética que atravessa a molécula de fulereno de pólo a pólo. Tal corrente é obtida segundo a relação de Byers-Yang [164]:

$$I = - \sum_{n,m} \frac{\partial \epsilon_{n,m}}{\partial \Phi_B} \Big|_{T=0}. \quad (3.47)$$

Duas interessantes revisões sobre o tema podem ser encontradas em: [166, 167]. Ainda, se utilizarmos a relação (3.47) na equação (3.46) encontramos:

$$I = \frac{\hbar V_f}{2\pi\alpha R} \sum_{n,m} \frac{n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2}}{\sqrt{\left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{g^2}{\alpha^2}}}. \quad (3.48)$$

Atente aqui que a corrente persistente depende dos parâmetros α e g . Que caracterizam as propriedades topológicas dos defeitos no sistema. Bem como que a corrente persistente é calculada a $T = 0$.

O fato das propriedades topológicas do sistema influenciarem na intensidade da corrente persistente de sistemas quânticos já tinha sido bem descrito em [168]. Também, apesar do fulereno C_{60} não ser um supercondutor, é possível torná-lo um supercondutor através de algumas

técnicas de dopagem. Quando mesclado com céssio ele apresenta uma temperatura crítica T_c em torno de 33 K. Bem como uma T_c de 28 K e 17 K, quando mesclado com rubídio e potássio, respectivamente [80, 81].

Motivados pelo modelo descrito nesse capítulo, daremos prosseguimento a tese avaliando a molécula de fulereno, agora sob a métrica de um referencial não-inercial.

Molécula de fulereno numa geometria tipo Gödel

Nesse capítulo vamos retomar a abordagem feita anteriormente para a molécula de fulereno C_{60} com simetria icosaédrica; agora tendo seu conteúdo de matéria sob rotação. Trabalho esse que serviu como resultado dessa tese [23]. Nele também temos um modelo do contínuo para fulereno submetido a ação de um fluxo de Aharonov-Bohm atravessando a molécula. Onde a mesma é agora descrita por uma métrica de Gödel com defeitos. Obtemos então o espectro e a corrente persistente do sistema. Bem como avaliamos a influência da vorticidade nos resultados.

4.1 Introdução:

Desde o advento da teoria da relatividade ficou claro que o tempo deixou de ser apenas um mero parâmetro da mecânica, que garante a causalidade, para ganhar o status de coordenada. Desde então o próprio discernimento sobre o conceito de evento - um dos mais fundamentais da física - mudou; elucidando-se agora como um componente de natureza puramente geométrica. Ou pelo menos na física clássica. Tendo em vista a existência de algumas estranhezas, como emanhamento e teletransporte, advindas da mecânica quântica. Isto posto, podemos falar de uma partícula que, literalmente esteja caminhando pela coordenada temporal.

Entretanto, sob a ótica da termodinâmica, a entropia do Universo tende sempre a aumentar. Garantindo a irreversibilidade dos fenômenos cotidianos. Não obstante, uma partícula fica impedida de realizar o caminho de volta pela coordenada temporal. E assim, o conceito de causalidade; ou genericamente falando: de causa e efeito; torna-se uma das noções mais enraizadas, não apenas na ciência, mas nas experiências comuns do dia-a-dia. Firmando-se como um dos mais austeros e pragmáticos conceitos da física.

Mesmo se mostrando um conceito congruente, a noção de causalidade permanece assunto de tema recorrente na física. Onde diversos modelos ameçam, pelo menos em tese, a solidez de sua essência. Na própria eletrodinâmica quântica (QED) as antipartículas são descritas por diagramas de Feynman exatamente iguais aos das partículas. Com excessão de viajarem na direção contrária do tempo [50]. Descrição essa que funciona muito bem, pelo menos nas proximidades da região onde são descritos espalhamentos por seções de choque, e a criação-aniquilação de pares nos processos da QED. Que é atualmente a teoria mais precisa da física.

Também na teoria da relatividade geral; mesmo com sua bem reputada base experimental;

e toda a sua abrangência na produção de modelos, que vão desde a previsão do Big Bang até a existência de singularidades como buracos negros; existem diversas soluções das equações de Einstein que possibilitam curvas fechadas nas linhas de tempo, ou loops temporais. De fato, a possibilidade de que uma linha de tempo num espaço-tempo pudesse ser fechada foi primeiramente proposta por Gödel [169]. Levantando a excitante e, todavia aparentemente prematura, ideia da possibilidade de viagens no tempo. Uma vez que a existencia de linhas de espaço-tempo fechadas tornaria possível que eventos futuros influenciassem em eventos passados.

Só o fato das linhas de espaço-tempo fechadas brotarem como possíveis soluções da relatividade geral. A primeira vista contrastando com a consistência em resultados apresentada pela teoria. Já é de demasiada justificativa para a contribuição de diversos teóricos sobre o tema. Em 1991, o próprio Stephen Hawking conjecturou [170] a impossibilidade de viagens ao passado com argumentos acerca de divergências na densidade de energia em intervalos de tempo na ordem da escala de Planck (10^{-44} segundos). Que é justamente o tempo requerido para que a luz viaje um comprimento de Planck (10^{-35} metros). Sendo assim necessário um entendimento maior da gravitação quântica para o assunto. De fato, sua conjectura diz que a física, pelo menos como a conhecemos, tende a impedir qualquer tipo de máquina do tempo. Também, outra abordagem interessante, e mais recente [171], é a de que as curvas fechadas do tipo espaço-tempo deveriam passar por algum horizonte de eventos. Impedindo assim a detecção da violação causal por um dado observador.

4.2 Abordagem Geométrica do Fulereno num Referencial Não-Inercial:

Como vimos Gödel foi quem primeiro propôs uma solução para as equações de Einstein num contexto onde o conteúdo de matéria está sob rotação [169]. Ou seja, onde é possível definir uma vorticidade Ω na métrica. Dizemos assim que temos um espaço-tempo sob rotação quando $\Omega \neq 0$. E que o mesmo é estático quando $\Omega = 0$. De fato, uma métrica do tipo Gödel em coordenadas cilíndricas é tal que [172]:

$$ds^2 = -[dt + H(r)d\phi]^2 + D^2(r)d\phi^2 + dr^2 + dz^2 \quad (4.1)$$

Onde:

$$H = \frac{\Omega}{l^2} \sinh^2(lr), \quad (4.2)$$

e:

$$D = \frac{1}{2l} \sinh(2lr). \quad (4.3)$$

Notamos que o termo $[dt + H(r)dy]^2$ evidencia os loops temporais. Bem como, temos Ω e l como constantes reais:

$$\Omega = \frac{H'}{2D}, \quad (4.4)$$

$$l^2 = \frac{D''}{4D}. \quad (4.5)$$

Vale ainda ressaltar que as equações (4.4) e (4.5) foram primeiramente propostas por Raychaudhuri e Thakurta [173] como condições necessárias para obtenção da homogeneidade de um espaço-tempo do tipo (4.1). Ainda, num outro trabalho, Rebouças e Tiomno [174] mostraram que as condições propostas em [173] não só são necessárias, bem como são suficientes para a homogeneidade do espaço. Desde que existam pelo menos cinco vetores de Killing linearmente independentes.

Quanto ao problema da causalidade, advindo da existência de curvas tipo-tempo fechadas; Rebouças, Tiomno e Galvão [174, 175], mostraram que a existência dos loops temporais está relacionado ao comportamento da função:

$$G(r) = D^2(r) - H^2(r) \quad (4.6)$$

De modo que, se $G(r)$ for negativo num dada região limitada, nessa região teremos loops temporais. Ou ainda, é possível definir três situações distintas para o problema da causalidade. A primeira, onde só existem regiões não-causais, é dada por: $0 \leq l^2 < \Omega^2$. A segunda, onde existe uma sequência infinita e alternada de regiões causais e não-causais, é dada por: $l^2 < 0$. E a terceira, onde não existem linhas do tipo-tempo fechadas, é dada por: $l^2 \geq \Omega^2$.

Também é possível definir três classes de soluções na métrica quanto a simetria do espaço-tempo que apresentam superfícies de curvatura constante. Para $l^2 = 0$ temos soluções planas, ou de corda cósmica girante [176]. Já para $l^2 < 0$ e $l^2 > 0$ temos soluções de simetria esférica de curvatura positiva, e soluções de simetria hiperbólica de curvatura negativa, respectivamente.

Nesse capítulo vamos abordar o problema da molécula de fulereno de modo análogo ao descrito no capítulo anterior. Avaliando assim a mudanças na interação das quasipartículas com a rede ao assumirmos o conteúdo de matéria sob rotação. Ou seja, partindo para um referencial não-inercial. Onde a molécula de C_{60} executa uma rotação em torno do eixo z , e é descrita por uma solução de simetria esférica de uma métrica de Gödel [23].

Em contraponto, sob uma métrica do tipo Gödel com soluções de simetria esférica ($l^2 < 0$) e dentro de regiões causais ($l^2 \geq \Omega^2$), faz-se necessário uma vorticidade imaginária. O que não faz sentido. Podemos, no entanto, admitir que nossa abordagem se dê numa das regiões causais dentro do conjunto de soluções $l^2 < 0$. Onde existe uma sequência infinita e alternada de regiões causais e não-causais.

Isto posto, vamos introduzir aqui, bem como na abordagem para o caso inercial [22], defeitos topológicos na métrica (4.1), que venham a representar as singularidades cônicas da molécula. Tendo assim:

$$ds^2 = -\left(dt + \alpha\Omega \frac{\sinh^2(lr)}{l^2} d\phi\right)^2 + \alpha^2 \frac{\sinh^2(2lr)}{4l^2} d\phi^2 + dr^2 + dz^2, \quad (4.7)$$

onde:

$$\begin{cases} -\infty < (t, z) < \infty \\ 0 \leq r < \infty \\ 0 \leq \phi < 2\pi \end{cases}$$

Observe que tais defeitos não mudam as condições de existência de curvas tipo-tempo na métrica [176]. Ainda, na abordagem da métrica (4.7) para a molécula de fulereno, torna-se imperativo partirmos para a casca. Ou seja, tomarmos $dz = 0$. Bem como, é conveniente, assim como nas referências [176, 177], introduzir as coordenadas $R = i/2l$ e $\theta = r/R$. Obtendo:

$$ds^2 = -\left(dt + 4\alpha\Omega R^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi\right)^2 + R^2 (d\theta^2 + \alpha^2 \sin^2\theta d\phi^2). \quad (4.8)$$

Vale ressaltar aqui que estamos adotando unidades naturais $c = \hbar = G = 1$. E que quando $\Omega = 0$ e $\alpha = 1$, a métrica (4.8) se reduz a métrica usual de Minkowski.

A escolha da base de tetradas é diagonal. E segundo a assinatura da métrica: $(-, +, +, +)$, é dada por:

$$\begin{cases} \theta^{(0)} = dt + 4\alpha\Omega R^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi \\ \theta^{(1)} = R d\theta \\ \theta^{(2)} = \alpha R \sin\theta d\phi \end{cases}$$

Como $\theta^a = e^a_\mu dx^\mu$, temos a seguinte representação para a matriz de tetradas:

$$e^a_\mu = \begin{pmatrix} e^0_t & e^0_\theta & e^0_\phi \\ e^1_t & e^1_\theta & e^1_\phi \\ e^2_t & e^2_\theta & e^2_\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4\alpha\Omega R^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ 0 & R & 0 \\ 0 & 0 & \alpha R \sin\theta \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

e sua inversa:

$$E^\mu_a = \eta_{ab} g^{\mu\nu} e^b_\nu = (e^a_\mu)^{-1} = \begin{pmatrix} E^t_0 & E^t_1 & E^t_2 \\ E^\theta_0 & E^\theta_1 & E^\theta_2 \\ E^\phi_0 & E^\phi_1 & E^\phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -4\Omega R \frac{\sin^2\theta/2}{\sin\theta} \\ 0 & (R)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & (\alpha R \sin\theta)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Também, para obtermos a conexão spinorial $\Gamma_\mu(x)$ para a métrica (4.8) é necessário obtermos as conexões de um-forma ($\omega_\mu^a{}_b(x)$). Para isso novamente recorremos a primeira das equações de estrutura de Maurer-Cartan para o caso sem torção [97, 98, 99]:

$$d\theta^a = \omega_\mu^a{}_b e^b{}_\nu dx^\nu \wedge dx^\mu. \quad (4.11)$$

Obtemos então as seguintes conexões:

$$\begin{cases} \omega_\phi^0{}_1 = -\omega_\phi^1{}_0 = 2\alpha\Omega R \sin\theta \\ \omega_\phi^2{}_1 = -\omega_\phi^1{}_2 = \alpha \cos\theta \\ \omega_\theta^0{}_2 = -\omega_\phi^2{}_0 = 2\Omega R \end{cases}$$

Observe, no entanto, que aqui tratamos de um problema dependente do tempo. Ou seja, estamos interessados em resolver a equação de Dirac:

$$-i\sigma^a E_a^\mu \nabla_\mu \psi = 0. \quad (4.12)$$

Uma vez que estamos adotando o sistema de unidades naturais : $\hbar = V_f = q = 1$. Bem como só assumiremos $\psi \rightarrow \exp(-i\epsilon t/\hbar)\psi$ depois. Sabemos também que as matrizes de Dirac são o produto tensorial de álgebras $SU(2)$: $\gamma_0 = \beta$; $\gamma_k = \beta\alpha_k$. Onde aqui tratamos de portadores de carga; ou seja, o férmion não é sua própria antipartícula. Assim estamos na representação spinorial de Dirac [51] $\alpha_k = \sigma_1 \otimes \sigma_k$; $\beta = \sigma_3 \otimes \mathbf{1}$. De modo que: $\sigma_\theta = \sigma_1 = \sigma_x$; $\sigma_\phi = \sigma_2 = \sigma_y$; $\sigma_t = \sigma_0 = \sigma_z$.

A conexão spinorial:

$$\Gamma_\mu = -\frac{1}{8}\omega_{\mu ab}[\sigma^a, \sigma^b], \quad (4.13)$$

é dada então por:

$$\begin{cases} \Gamma_\phi = -\frac{i}{2}(\omega_{\phi 01}\sigma_2 + \omega_{\phi 12}\sigma_3) \\ \Gamma_\theta = -\frac{i}{2}\omega_{\theta 20}\sigma_1 \end{cases}$$

Uma vez determinadas as conexões, também assumimos a rotação do campo do monopolo, como feito na equação (3.25). Assim a equação de Dirac efetiva para o modelo com os acoplamentos de gauge, devidos a interação com a curvatura $\Gamma_\mu(x)$, com o campo do monopolo A_μ e com o *background* da corda magnética, fica:

$$-i\left[\sigma^a E_a^\theta \left(\partial_\theta - \Gamma_\theta\right) + \sigma^a E_a^\phi \left(\partial_\phi - \Gamma_\phi - i\frac{\Phi_B}{2\pi} - iA_\phi^k\right) + \sigma^a E_a^t \partial_t\right]\psi^k = 0. \quad (4.14)$$

4.3 Espectro e Corrente Persistente:

É razoável que explicitemos os números quânticos quando a derivada em relação a ∂_t e ∂_ϕ . Ou seja, análogo ao que foi feito em (3.34), vamos também aqui assumir o *ansatz*:

$$\psi^k \rightarrow \exp(im\phi) \exp(-i\epsilon t) \psi_{n,m}^k(\theta). \quad (4.15)$$

Assim a equação (4.14) fica:

$$\left\{ -i\epsilon\sigma^3 + 4i\Omega\epsilon R \frac{\sin^2\theta/2}{\sin\theta} \sigma^2 + \frac{\sigma^1}{R} (\partial_\theta - \Gamma_\theta) + \frac{\sigma^2}{\alpha R \sin\theta} \left[i \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) - \Gamma_\phi - iA_\phi^k \right] \right\} \psi_{n,m}^k = 0. \quad (4.16)$$

Substituindo as conexões spinoriais:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\sigma^1}{R} \left(\frac{d}{d\theta} + \frac{\cot\theta}{2} \right) + \frac{i\sigma^2}{\alpha R \sin\theta} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} - A_\phi^k + 4\alpha\Omega\epsilon R \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) + \right. \\ & \left. + \frac{i}{2\alpha R \sin\theta} \left(\omega_{\phi 01} - \alpha \sin\theta \omega_{\theta 02} \right) - i\epsilon\sigma^3 \right] \psi_{n,m}^k = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

E lembrando que: $A_\phi^k = kg \cos\theta$, bem como assumindo que: $\lambda = \epsilon R$, temos:

$$\left[\frac{d}{d\theta} + \left(\frac{1}{2} + k \frac{g}{\alpha} \right) \cot\theta - \frac{k}{\alpha \sin\theta} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + 4\alpha\Omega\lambda \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \right] \psi_{n,m}^{(k)} = i\lambda \psi_{n,m}^{(-k)}. \quad (4.18)$$

Observe que quando tomamos $\Omega = 0$ em (4.18), recuperamos a equação (3.35) e, consequentemente os resultados previstos nas referências [18, 19, 20, 21].

Dando prosseguimento vamos combinar as expressões para $\psi_{n,m}^+(\theta)$ e $\psi_{n,m}^-(\theta)$. O que resulta em:

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \sin\theta \frac{d}{d\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \cos\theta + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \right. \\ & \left. + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} - 4\Omega\lambda \frac{\sin^2\theta/2}{\sin\theta} \left[k + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} - g \cos\theta \right) + 4\Omega\lambda \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \right\} \psi_{n,m}^k = 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Assumindo $\zeta = \cos\theta$, temos:

$$\begin{aligned} & \left\{ (1 - \zeta^2) \frac{d^2}{d\zeta^2} - 2\zeta \frac{d}{d\zeta} - \frac{1}{1 - \zeta^2} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \zeta + \right. \right. \\ & \left. + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} - 4\Omega\lambda \frac{1 - \zeta}{2\sqrt{1 - \zeta^2}} \left[k + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} - g\zeta \right) + \right. \\ & \left. \left. + 4\Omega\lambda \left(\frac{1 - \zeta}{2} \right) \right] \right\} \psi_{n,m}^k = 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Bem como fazendo $x = \frac{1+\zeta}{2}$:

$$\left\{ x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + (1-2x) \frac{d}{dx} - \frac{1}{4x(1-x)} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 + \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) (1-2x) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} - 2\Omega\lambda \sqrt{\frac{1-x}{x}} \left[k + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} - g \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + 4(1-x) \left(\Omega\lambda + \frac{g}{\alpha} \right) \right] \right\} \psi_{n,m}^k = 0. \quad (4.21)$$

Que como podemos ver é uma EDO bastante extensa e de difícil solução. Entretanto, baseado no comportamento assintótico dos spinores, podemos supor o *ansatz*:

$$\psi_m^k = x^{C_+} (1-x)^{C_-} H_{n,m}^k(x). \quad (4.22)$$

Com:

$$C_{\pm} = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \pm \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \mp \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right|. \quad (4.23)$$

De modo que, substituindo (4.22) em (4.21) obtemos uma equação com a estrutura de uma hipergeométrica confluyente:

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \left\{ \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) - \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right| + 1 + \right. \right. \\ \left. \left. - 2 \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) x \right\} \frac{d}{dx} - \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) + \right. \\ \left. + (1 - 8\Omega^2) \lambda^2 - 2\Omega\lambda \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right] - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right] H_{n,m}^k(x) = 0 \quad (4.24)$$

Do mesmo modo como feito na equação (3.41), ao comparar (4.24) com a hipergeométrica padrão:

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \{ \mu + 1 - (\mu + \nu + 2)x \} \frac{d}{dx} + n(n + \mu + \nu + 1) \right] F(A, B, C, x) = 0, \quad (4.25)$$

identificamos:

$$\mu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) - \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right|, \quad (4.26)$$

e

$$\nu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) - \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) + \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right|. \quad (4.27)$$

E chegamos a uma equação do segundo grau dada por:

$$(1 - 8\Omega^2)\lambda^2 - 2\Omega \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right] \lambda - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{g^2}{\alpha^2} = 0. \quad (4.28)$$

Que solucionada pelo modo padrão nos dá:

$$\lambda = \frac{1}{2(1 - 8\Omega^2)} \left\{ 2\Omega \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right] \pm \sqrt{\Delta} \right\}. \quad (4.29)$$

Com:

$$\Delta = 4\Omega^2 \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right]^2 - 4(1 - 8\Omega^2) \left[\frac{g^2}{\alpha^2} - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 \right]. \quad (4.30)$$

Resultando no espectro para os portadores de carga sob a molécula de fulereno C_{60} com simetria icosaédrica e com seu conteúdo de matéria sob rotação:

$$\varepsilon_{n,m} = \frac{1}{2R(1 - 8\Omega^2)} \left\{ 4\Omega \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right] + \right. \\ \left. \pm 2 \sqrt{2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right]^2 \Omega^2 - (1 - 8\Omega^2) \left[\frac{g^2}{\alpha^2} - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 \right]} \right\} \quad (4.31)$$

Podemos observar que em (4.31) também temos ε inversamente proporcional a R , ainda sem alterar a distância entre os níveis. E que a presença do fluxo Φ_B provoca um *shift* na componente do momento angular. De fato, quando assumimos o conteúdo de matéria estático ($\Omega = 0$) recuperamos o resultado para o caso inercial obtido na equação (3.46). E, consequentemente os resultados das referencias [18, 19, 20, 21] quando temos $\alpha = 1$ e $\Phi_B = 0$.

Atente ainda que o resultado obtido em [176] para a solução esfericamente simétrica via equação de Klein-Gordon, quando assumimos $\Omega = \Phi_B = M^2 = k^2 = 0$ é idêntico ao da equação (4.31). Desde que:

$$\alpha = \pm 2g. \quad (4.32)$$

Para isso, no entanto, a condição de quantização de Dirac [178] imposta na referência [179] deve ser satisfeita:

$$2g = \text{inteiro}. \quad (4.33)$$

Ou seja, em [179] a dinâmica quântica de partículas carregadas sob a superfície de uma esfera com um monopolo no centro é estudada. Bem como é um dos resultados obtidos em [176] na presença de estados degenerados ($\alpha = \text{inteiro}$). Tais resultados se associam aos nossos [22, 23] na ausência de defeitos na esfera. Assim, como em [176] o espectro é obtido para

uma partícula sem spin via Klein-Gordon, a premissa proposta nessa tese quanto a analogia a molécula do C_{60} , não é uma boa premissa para os resultados obtidos em [176, 179]. Por isso a diferença na carga do monopolo entre os modelos.

Um outro resultado interessante que podemos extrair do nosso modelo é a existência da corrente persistente a $T = 0$. Obtida a partir da relação de Byers-Yang:

$$I = - \sum_{n,m} \frac{\partial \epsilon_{n,m}}{\partial \Phi_B} \Big|_{T=0}. \quad (4.34)$$

Tendo como resultado:

$$I = \frac{1}{2\pi\alpha R(1-8\Omega^2)} \sum_{n,m} \left\{ 2\Omega + \frac{(1-8\Omega^2) \left[n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right] + 2\Omega^2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right]}{\sqrt{2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right]^2 \Omega^2 - (1-8\Omega^2) \left[\frac{g^2}{\alpha^2} - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2}} \right\} \quad (4.35)$$

Observe que (4.35) recupera o resultado obtido para o caso inercial na equação (3.48) quando adotamos $\Omega = 0$. Mostrando assim a solidez da abordagem geométrica proposta nessa tese para a molécula de C_{60} sob rotação num espaço-tempo tipo Gödel.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Iniciamos esta tese com uma discussão sobre o advento dos alótropos do carbono. Vimos que tais materiais vêm ganhando destaque na nanociência, e que fulerenos e nanotubos advêm de uma matriz de um único material genuinamente bidimensional: o grafeno. Sendo esse um forte candidato a substituir o silício e outros semicondutores na nanoeletrônica.

No capítulo 1 ainda discutimos a singular estrutura de bandas do grafeno. De modo que, nas proximidades dos pontos de Fermi (pontos K), ou a baixas energias, temos a dinâmica de seus portadores de carga interagindo com a rede descrita por uma equação de Dirac efetiva para férmions quirais não-massivos. Dado ainda o comportamento distinto dos férmions na rede de grafeno; bem como dos demais alótropos que podem ser construídos através de sua matriz; discutimos que tais materiais podem funcionar como uma espécie de laboratório de mesa para efeitos típicos de altas energias.

No capítulo 2 revemos como os defeitos topológicos na matéria condensada podem ser modelados via uma geometria de Einstein-Cartan. Sendo possível descrever defeitos do tipo desclinação e deslocação por meio de curvatura e torção do espaço, respectivamente. Também vimos como a interação das quasipartículas da rede com os defeitos pode ser descrita por acoplamentos de gauge, introduzidos numa derivada covariante. Elucidando assim uma física de longa distância na rede. De difícil acesso para cálculos de primeiros princípios.

No capítulo 3, após um panorama das abordagens no limite do contínuo para moléculas de fulereno com simetria icosaédrica (simetria I_h), retratamos a molécula por um viés geométrico de uma esfera bidimensional com defeitos. Sendo esse modelo um dos resultados obtidos nessa tese [22]. Nele descrevemos a interação com a curvatura do espaço e com as singularidades cônicas por acoplamentos de gauge na equação de Dirac efetiva em $2 + 1$ dimensões. Mostrando-se eficiente a baixas energias, ou seja, um bom modelo nas proximidades do defeito. Então obtemos outra contribuição da tese: o espectro e a corrente persistente a $T = 0$ para o C_{60} , quando o mesmo é exposto a um *background* de uma corda magnética quiral. Vimos ainda que nossos resultados recuperam os resultados obtidos em demais abordagens [18, 19, 20, 21] para a molécula de C_{60} em suas situações particulares.

Um outro resultado dessa tese é obtido quando assumimos a molécula de fulereno C_{60} com seu conteúdo de matéria sob rotação [23]. A discussão é feita no capítulo 4. Nele descrevemos agora a molécula segundo uma métrica do tipo Gödel com simetria esférica. Discutimos o

problema da causalidade no modelo e obtemos espectro e corrente persistente em termos da vorticidade (Ω) do espaço-tempo. Também vimos que nossa descrição para a molécula em rotação funciona muito bem dentro das regiões causais, ou seja, dentro do conjunto de soluções $l^2 < 0$. Evitando assim uma vorticidade imaginária ($\Omega^2 < 0$) no modelo. Recuperando ainda, mais uma vez, os resultados obtidos em [18, 19, 20, 21], em suas situações particulares. Bem como o caso inercial [22], quando assumimos $\Omega = 0$.

Como perspectivas de novos trabalhos podemos propor: o estudo da viabilidade do uso de defeitos topológicos para a construção de portas lógicas, a implementação de uma computação quântica holonômica em estruturas de grafeno com defeitos. Utilizando de uma modelagem via dimensões extras, ou surgimento de fases em níveis de Landau. Podemos ainda, dentre as muitas possibilidades de continuidade deste trabalho, avaliar demais propriedades do fulereno C_{60} no contexto geométrico; ampliando o estudo ao aparecimento do efeito Hall quântico em geometrias não-euclidianas. Bem como dedicar um olhar mais atento ao estudo do espalhamento de férmions no grafeno (fulereno e nanotubos) na presença de defeitos. Explorando ainda mais essa fascinante interface entre os efeitos de altas energias e gravitacionais com a matéria condensada.

Breve revisão da teoria de defeitos em cristais

Sabemos que no caso de um cristal ideal. Sendo $\vec{a}_i$ os vetores de base da rede; com $|\vec{a}_i| = 1$. A posição de um n-ésimo átomo numa rede tridimensional é:

$$\vec{x}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (\text{A.1})$$

Com a ação de forças externas no cristal, as deformações mudam a posição do n-ésimo átomo por:

$$\vec{x}_n \rightarrow \vec{x}'_n = \vec{x}_n + \vec{u}_n(\vec{x}) \quad (\text{A.2})$$

No limite do contínuo ($a \rightarrow 0$), as deformações podem ser descritas por um campo vetorial de deslocamento $u_i(x)$.

$$x'_i = x_i + u_i(x) \quad (\text{A.3})$$

Assim a distância infinitesimal entre dois pontos após uma deformação é:

$$dx'_i = dx_i + \partial_j u_i dx^j \quad (\text{A.4})$$

E o elemento da métrica é tal:

$$dx'^2_i = dx^2_i + 2\epsilon_{ij} dx^i dx^j \quad (\text{A.5})$$

Onde:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} [\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i u_k \partial_j u^k] \quad (\text{A.6})$$

é o tensor simétrico de deformação.

Para obtermos uma aproximação para defeitos lineares, tomamos [88, 89]:

$$\partial_i u_j \ll 1 \quad (\text{A.7})$$

Assim o tensor de deformação fica ¹:

¹ Observe que para escrever a métrica via tensor de deformação pode ser, ao contrario da abordagem de katanaev [6], um trabalho excessivamente exaustivo. E, muitas vezes, inviável.

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}[\partial_i u_j + \partial_j u_i] \quad (\text{A.8})$$

Também, por definição, a densidade de energia elástica do meio deformado (no ponto) é [89]:

$$e(x) = \frac{1}{2}c_{ijkl}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl} \quad (\text{A.9})$$

Onde c_{ijkl} é o tensor de elasticidade. Que é simétrico pelas permutações: $i \leftrightarrow j$, $k \leftrightarrow l$, $ij \leftrightarrow kl$.

No entanto, quando o meio é submetido a uma dada tensão elástica, o tensor de deformação é alterado no ponto por:

$$\delta e = c_{ijkl}\epsilon_{kl}\delta\epsilon_{ij} \quad (\text{A.10})$$

Desse modo o tensor de torção é dado por:

$$\sigma_{ij} = \frac{\delta e}{\delta\epsilon_{ij}} = c_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (\text{A.11})$$

Também é possível definir, para um meio isotrópico, o tensor de elasticidade em termos da constante de Lamé (λ) e do *shear modulus* (μ), por [88, 89]:

$$c_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{A.12})$$

De modo que a equação (A.11) fica:

$$\sigma_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij}\epsilon_{kk} \quad (\text{A.13})$$

Compondo uma das equações do movimento da teoria elástica das deformações lineares.

Também, se considerarmos que as forças externas aplicadas no cristal, causando as deformações, compõem uma densidade de força $f_i(x)$. O trabalho realizado por essa força sob um elemento de volume do sólido é:

$$w(x) = -f_i(x)u_i(x) \quad (\text{A.14})$$

E a força total sob o sistema é:

$$F_T = \int [e(x) + w(x)]d^3x \quad (\text{A.15})$$

Podemos então definir o estado de equilíbrio na rede minimizando a energia total em relação a $\delta u_i(x)$. Ou seja:

$$\int [\partial_i(\delta u_j \sigma_{ij}) - \delta u_j \partial_i \sigma_{ij}] d^3x - \int f_j \delta u_j d^3x = 0 \quad (\text{A.16})$$

Aplicando o teorema de Gauss no primeiro termo, termo:

$$\int \sigma_{ij} \delta u_i dS_j - \int (\partial_i \sigma_{ij} + f_j) \delta u_j d^3x = 0 \quad (\text{A.17})$$

De modo que podemos descartar a integral de superfície. Já que $\delta u_i \rightarrow 0$ na borda da superfície, para que a força externa seja definida no interior do sólido. Assim temos:

$$\partial_i \sigma_{ij} + f_j = 0 \quad (\text{A.18})$$

como a segunda equação da teoria das deformações lineares.

Breve revisão sobre os sólidos Platônicos

O estudo da geometria iniciou-se cerca de sete séculos antes de Cristo, na Grécia antiga. Vários pensadores contribuíram para o seu desenvolvimento. Dentre eles: Tales de Mileto (640 - 546 a.c), Pitágoras (580 - 500 a.c), Eudóxio (408 - 355 a.c) e Platão (428 - 348 a.c). Todos contribuíram para que Euclides (323 - 285 a.c) desenvolvesse sua famosa obra: "Elementos". Instituído o que posteriormente tornaria-se a geometria Euclidiana. Baseado na matemática da Grécia antiga, Platão ateu-se aos estudos dos poliedros regulares. Ou seja, poliedros que tenham como faces apenas polígonos regulares, todos idênticos, e que também apresentem todos os bicos idênticos.

Para que um poliedro seja definido como um poliedro de Platão, devemos garantir que todas as faces sejam polígonos regulares com o mesmo número de lados. E que todos os bicos sejam formados com o mesmo número de arestas. Existem cinco poliedros de Platão:

1) Tetraedro Regular:

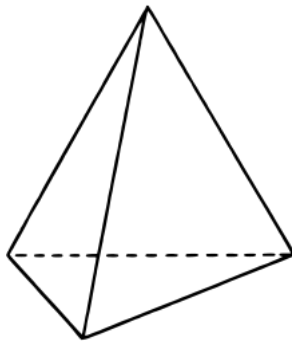


Figura B.1 Figura do Tetraedro Regular [181].

2) Octaedro Regular:

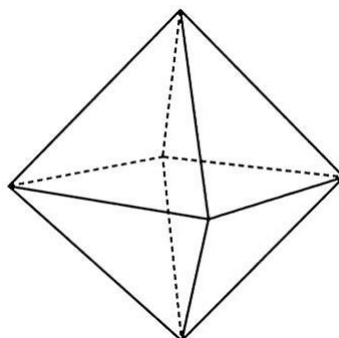


Figura B.2 Figura do Octaedro Regular [182].

3) Icosaedro Regular:

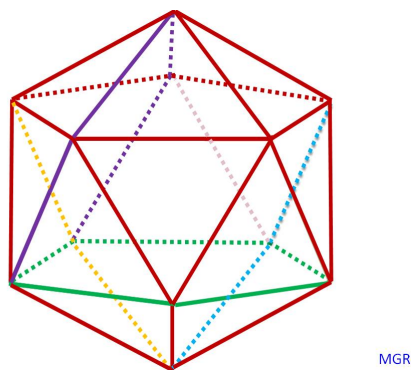


Figura B.3 Figura do Icosaedro Regular [183].

4) Hexaedro Regular, ou Cubo:

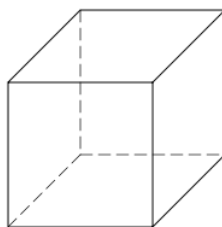
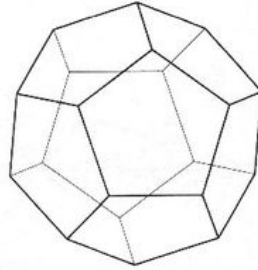


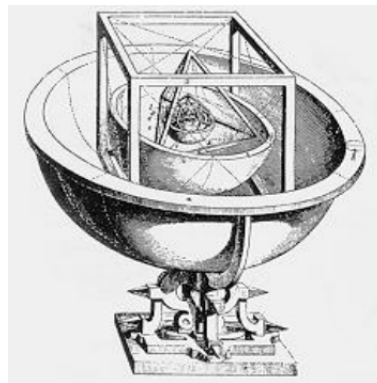
Figura B.4 Figura do Hexaedro Regular [184].

5) Dodecaedro Regular:

**Figura B.5** Figura do Dodecaedro Regular [185].

Os sólidos Platônicos ganharam maior repercussão na física com Kepler (1571 - 1630). Em seus trabalhos ele tentou associar padrões geométricos na posição dos planetas no Universo. Ele achava que uma astronomia perfeita deveria incorporar os poliedros regulares de Platão.

Na época de Kepler se conheciam seis planetas: Mercúrio, Vênus, Terra, Marte, Júpiter e Saturno. Segundo Kepler esses planetas deveriam ser harmonizados com os cinco poliedros regulares de Platão. Ele afirmou que as órbitas em volta do Sol estavam circunscritas em esferas que envolviam os cinco poliedros Platônicos. A órbita de Saturno estava circunscrita em um cubo. A este, se inseria outra esfera que continha a órbita de Júpiter. Nesta se inscrevia um tetraedro, e sobre ele uma esfera com a órbita de Marte. Entre Marte e a Terra o dodecaedro, entre a Terra e Vênus um icosaedro, e finalmente entre Vênus e Mercúrio, um octaedro (Ver figura B.6):

**Figura B.6** Órbitas dos Planetas segundo Kepler [180].

Para que possamos construir poliedros Platônicos é necessário que utilizemos apenas polígonos regulares congruentes. Também sabemos que para que um poliedro exista é necessário que tenhamos pelo menos três faces unidas em cada vértice. Sabendo que o triângulo equilátero

é o polígono regular congruente com menor número de lados, podemos estudar a planificação de poliedros onde a soma dos ângulos das faces poligonais em cada vértice seja menor que 360° . Com três triângulos equiláteros unidos pelo mesmo vértice, temos 180° como a soma dos seus ângulos. Já para quatro triângulos equiláteros a soma dos ângulos no vértice é 240° , e obtemos assim o octaedro. Com cinco triângulos no vértice temos uma soma angular no vértice de 360° , obtendo o icosaedro. No entanto, quando temos seis triângulos no vértice, a soma é 360° . O que deixa todos os ângulos num mesmo plano. Impossibilitando a formação do poliedro (Ver fig B.7):

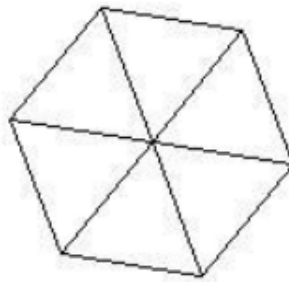


Figura B.7 Planificação do vértice com seis triângulos equiláteros.

O próximo polígono regular congruente é o quadrado. Que obviamente só pode construir um cubo. Uma vez que quatro quadrados também deixariam todos o ângulos do vértice no mesmo plano (Ver fig B.8):

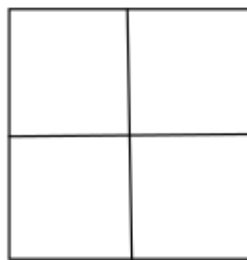


Figura B.8 Planificação do vértice com quatro quadrados.

Quando partimos para os pentágonos não é possível inserir mais do que três pentágonos adjacentes num mesmo vértice sem que a soma dos ângulos seja maior que 360° (Ver fig B.9):

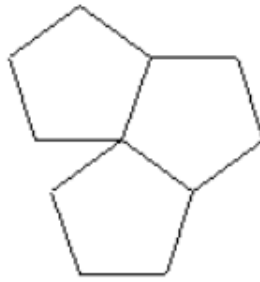


Figura B.9 Planificação do vértice com três pentágonos.

Para os demais polígonos regulares congruentes, como: o hexágono, o heptágono, o octágono, etc.; também não é possível construir um sólido Platônico. Pois não é possível planificar um vértice obtendo a soma dos ângulos das faces poligonais menor que 360° .

Tendo em vista as propriedades obtidas para a geometria espacial, Leonhard Euler conseguiu estabelecer uma importante relação entre o número de arestas (A), vértices (V) e faces (F) de um poliedro convexo qualquer:

$$V - A + F = 2 \quad (\text{B.1})$$

Tal teorema nos dá as condições necessárias e suficientes de um poliedro convexo com V vértices, A arestas e F faces.

Referências Bibliográficas

- [1] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [2] A. K. Geim, K. S. Novoselov, Nature Materials **6**, 183-191 (2007).
- [3] R. Peierls, *More Surprises in Theoretical Physics*, Princeton.
- [4] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, Nature **318**, 162 (1985).
- [5] M. O. Katanaev, I. V. Volovich, Ann. Phys., **216**, 1-28 (1992).
- [6] M. O. Katanaev, arXiv: cond-mat/0407469 (2005).
- [7] T. Vachaspati, Phys. Rev. D **44**, 3723 (1991).
- [8] P. W. Higgs, Phys. Lett. **12**, 132 (1964).
- [9] P. W. Higgs, Phys. Rev. Lett. **13**, 508 (1964).
- [10] A. Vilenkin, Phys. Rev. D **23**, 852 (1981).
- [11] B. Linet, Phys. Rev. D **33**, 1333 (1986).
- [12] M. Barriola, A. Vilenkin, Phys. Rev. Lett. **63**, 341 (1976).
- [13] T. W. B. Kibble, J. of Phys. A **9**, 1387 (1976).
- [14] J. Lizarraga, J. Urrestilla, D. Daverio, et. al., Phys. Rev. Lett. **112**, 171301 (2014).
- [15] J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, Nucl. Phys. B **406**, 771-794 (1993).
- [16] J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. Lett. **69**, 172-175 (1992).
- [17] S. Coleman, *The Magnetic Monopole Fifty Years Later, in The Unity of Fundamental Interactions* Plenum, New York (1983).
- [18] A. A. Abrikosov Jr., arXiv:hep-th/0212134v1 (2002).
- [19] V. A. Osipov, Phys. Lett. A **164**, 327 (1992).
- [20] D. V. Kolesnikov, V. A. Osipov, Eur. Phys. J. B **49**, 465 (2006).

- [21] K-I. Imura, Y. Yoshima, Y. Takane, T. Fukui, Phys. Rev. B **86**, 235119 (2012).
- [22] E. Cavalcante, C. Furtado, J. Phys. and Chem. of Solids **75**, 1265-1268 (2014).
- [23] E. Cavalcante, C. Furtado, J. Carvalho, *Geometric approach for the C₆₀ fullerenes in a Gödel-type spacetimes (Preprint)* (2015).
- [24] E. Epelbaum, H. Kribs, D. Lee, Ulf-G. Meißner, Phys. Rev. Lett. **106**, 192501 (2011).
- [25] C. Klein, C. S. Hurlbut, *Manual of Mineralogy* Wiley (1998).
- [26] J. B. Russel, *Química Geral* Pearson, São Paulo (1994).
- [27] G. D. Wilk, M. R. Wallace, J. M. Anthony, J. Appl. Phys. **89**, 5243 (2001).
- [28] A. K. Geim, A. H. MacDonald, Phys. Today **August**, 35-41 (2007).
- [29] L. Dong., Q. Chen, Mater Sci. China **4**, 45 (2010).
- [30] C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, Science **321**, 385 (2008).
- [31] A. K. Geim, Science **324**, 530 (2009).
- [32] Y. M. Lim, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, et. al., Science **327**, 662 (2010).
- [33] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, et. al., Science **320**, 356-358 (2008).
- [34] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, K. I. Katsnelson, et. al., Phys. Rev. Lett. **100**, 016602-016605 (2008).
- [35] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, et. al., Nano Letters **8**, 902-907 (2008).
- [36] R. R. Nair, P. Blake, U. M. Grigorenko, et. al., Science **320**, 1308 (2008).
- [37] A. K. Geim, P. Kim, Scientific American **April** (2008).
- [38] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, et. al., Science **306**, 666 (2004).
- [39] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, Nat. Phys. **2**, 620 (2006).
- [40] N. D. Mermin, Phys. Rev. **176**, 250 (1968).
- [41] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, Nature **438**, n 10, 197-200 (2005).
- [42] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Cornell University (1976).
- [43] I. S. Oliveira, V. L. B. de Jesus, *Introdução à Física do Estado Sólido*, 2º ed., Livraria da Física, São Paulo (2011).

- [44] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009).
- [45] J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **59**, R 2474 (1999).
- [46] M. I. Katsnelson, *Graphene - Carbon in Two Dimension*, Cambridge Press (2012).
- [47] O. Vafek, cond-mat/0701145 (2007)
- [48] K. Nakada, M. Fugita, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [49] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics*, Third Edition, Springer (2000).
- [50] F. Mandl, G. Shaw, *Quantum Field Theory*, Second Edition, Wiley (2010).
- [51] P. B. Pal, arXiv: 1006.1718v1 (2010).
- [52] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, R 2449 (1984).
- [53] O. Boyanovsky, R. Blankenbecler, R. Yaholom, *Nucl. Phys. B* **270**, 483 (1986).
- [54] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte, arXiv: 0706.3016v2 (2007).
- [55] A. Shapere, F. Wilczek, *Geometric Phases in Physics*, World Scientific, Singapore (1989).
- [56] F. Moraes, *Brazilian J. Phys.* **30**, N 02 (2000).
- [57] R. B. Capaz, H. Chacham, *Ciência Hoje* **33**, 21-27 (2003).
- [58] X. Wang, et. al., *Nano Letters* **9**, 3137-3147 (2009).
- [59] Imagem extraída do site: www.history2aar.blogspot.com
- [60] M. S. Dresselhaus, P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, USA, Academic Press, vol. 1, pp. 110-129.
- [61] M. D. Newton, R. E. Stanton, *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 2469 (1986).
- [62] H. P. Liithi, J. Almlöf, *Chem. Phys. Lett.* **135**, 357 (1987).
- [63] S. Latpathy, *Chem. Phys. Lett.* **130**, 545 (1986).
- [64] R. C. Haddon, L. E. Bruss, K. Raghavacari, *Chem. Phys. Lett.* **125**, 459 (1986).
- [65] S. Larson, A. Volosov, A. Rosén, *Chem. Phys. Lett.* **137**, 501 (1987).
- [66] V. Elser, R. C. Haddon, *Nature* **325**, 792 (1987).

- [67] P. W. Fowler, P. Lazzeretti, R. Zanasi, Chem. Phys. Lett. **165**, 79 (1990).
- [68] R. C. Haddon, V. Elser, Chem. Phys. Lett. **169**, 362 (1990).
- [69] Imagem extraída do site: www.gettyimagens.pt
- [70] A. Maiti, C. J. Brabec, J. Bernhole, Phys. Rev. Lett. **70**, n 20, 3023-3027 (2006).
- [71] J. Cioslowski, E. J. Fleishman, Chem. Phys. Lett. **94**, 3730 (1991).
- [72] B. L. Kharisov, M. A. Méndez-Rojas, Ingenierias **21**, Vol. VI (2003).
- [73] P. W. Fowler, D. E. Manolopoulos, *An Atlas of Fullerenes*, Claredon Press, Oxford (1995).
- [74] W. Zhao, J. Tang, A. V. Falster, W. B Simmons, R. L. Sweany, *Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials*, Proceedings Electrochemical Society, 1115-1126 (1996).
- [75] J. K. Heath, S. C. O'Brian, Q. Zhang, et. al., J. Am Chem. Soc. **107**, 7779 (1985).
- [76] P. A. Heiney, et. al., Phys. Rev. Lett. **66**, 2911 (1991).
- [77] G. Samara, et. al., Phys. Rev. B **67**, 3136 (1991).
- [78] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [79] N. Hamada, S. Sawada, A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **68**, 1579 (1992).
- [80] R. F. Curl, R. E. Smalley, Scientific American **out.**, 54 (1991).
- [81] J. Crane, Chemistry Review **4** (3), 2-8 (1995).
- [82] J. Cami, arXiv 1210.1730 v1 [astro-ph.GA] (2012).
- [83] A. Verkhovtsev, A. V. Korol, A. V. Solov'yov, arXiv 1202.6211 v2 [physics.atm-clus] (2012).
- [84] G. Brinkmann, J. Goedgebeur, B. D. McKay, arXiv 1207.7010 v2 [math.CO] (2012).
- [85] E. Noether, Math. Phys. Klasse, 235-257 (1918).
- [86] D. Shechtman, I. Bhech, D. Gratias, J. W. Chan, Phys. Rev. Lett., **53**, 1951-1953 (1984).
- [87] Imagem extraída do site: www.qnint.s bq.org.br.
- [88] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 2º ed., Pergamon Press (1970).

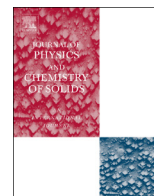
- [89] H. Kleinert, *Gauge Fields in Condensed Matter, Vol II - Stresses and Defects*, World Scientific, Singapore (1989).
- [90] R. M. Wald, *Quantum Field Theory in Curved Spacetimes and Black Hole Thermodynamics*, USA, Chicago Press (1994).
- [91] A. Zee, *Quantum Field Theory in a Nutshell*, USA, Princeton Press (2003).
- [92] P. G. Bergmann, *Introduction to the Theory of Relativity*, Dover (1976).
- [93] S. Carroll, *Spacetime and Geometry - An Introduction to General Relativity*, Addison Wesley (2004).
- [94] Y. Aharonov, D. Bohm, *Significance of Eletromagnetic Field*, Proc. R. Soc. London, Ser. A **115**, 485 (1959).
- [95] D. Soares, *II Escola do CBPF - O Cálculo de Formas Diferenciais e a equação de Dirac em espaços-curvos*, Cento Brasileiro de Pesquisas Físicas.
- [96] R. M. Wald, *General Relativity*, Chicago Press (1998).
- [97] C. W. Misner, K. S. Thorne, J. A. Wheeler, *Gravitation*, W. H. Freeman, New York (1973).
- [98] M. Nakahara, *Geometry Topology and Physics*, Institute of Physics Publishing Bristol (2003).
- [99] N. D. Birrel, P. C. W. Davies, *Quantum Fields in Curved Spaces*, Cambridge (1982).
- [100] P. O'Donnel, *Introduction to 2-Spinors in General Relativity*, World Scientfic (2003).
- [101] R. Geroch, J. Math. Phys. **11**, 343, (1970).
- [102] R. Penrose, W. Rindler, *Spinor and Space-Time: Vol. I - Two-Spinor Calculus and Relativistic Fields*, Cambridge (1987).
- [103] F. C. Frank, *On the theory of liquid cristals*, Discussions Farad. Soc. **25**, 19-28 (1958).
- [104] I. E. Dzyaloshinskii, G. E. Volovich, J. Physique, **39(6)**, 693-700 (1978).
- [105] J. A. Hertz, Phys. Rev. B, **18**, 4875-4885 (1978).
- [106] W. L. Bragg, J. F. Nye, Proc. Roy. Soc. A, **190**, 474 (1947).
- [107] M. Kleman, *Points, Lignes, Parois: Dans Les Fluides Anisotropes et les Solides Cristal-lins*, Editions de Physique, France (1977).

- [108] D. R. Nelson, *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics*, Cambridge (2002).
- [109] J. K. Pachos, Cont. Phys. **Vol. 00**, N 00, 1-20, June, (2008).
- [110] R. Tamura, M. Tsukada, Phys. Rev. B, **49**, 7697 (1994).
- [111] R. Tamura, M. Tsukada, Phys. Rev. B, **56**, 1404 (1997).
- [112] S. Berber, Y-K. Kwon, D. Tomanek, Phys. Rev. B, **62**, 2291 (2000).
- [113] J.-C. Charlier, G. M. Rignanese, Phys. Rev. Lett., **86**, 5970 (2001).
- [114] K. Kobayashi, Phys. Rev. B, **61**, 8496 (2000).
- [115] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea, Phys. Reports **496**, 109-148 (2010).
- [116] A. J. Stone, D. J. Wales, Chem. Phys. Lett., **128** (1986).
- [117] A. Hashimoto, K. Suenaga, A. Gloter, et. al., Nature, **430**, 870 (2004).
- [118] J. Coraux, A. T. N'Diaye, C. Busse, T. Michely, Nano Lett., **2**, 565 (2008).
- [119] B. An, S. Fukuyama, K. Yokogawa, et. al., Appl. Phys. Lett., **23** (2001).
- [120] E. J. Duplock, M. Scheffler, P. J. D. Lindan, Phys. Rev. Lett., **92** (2004).
- [121] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, et. al., Nature, **446**, 60 (2007).
- [122] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, et. al., Solid State Commun., **143**, 101 (2007).
- [123] A. Carpio, L. L. Bonilla, F. de Juan, M. A. H. Vozmediano, New J. Phys. B, **79**, 075413 (2009).
- [124] K. Suenaga, H. Wakabayashi, M. Koshino, et. al., Nature Nanotechnol, **2**, 358 (2007).
- [125] M. B. Nardelli, B. I. Yakaobson, J. Bernholc, Phys. Rev. B, **57**, 4277 (1998).
- [126] C. N. Yang, R. L. Mills, Phys. Rev. Lett., **95**, 631 (1954).
- [127] C. N. Yang, R. L. Mills, Phys. Rev. Lett., **96**, 191 (1954).
- [128] J. F. Cornwell, *Group Theory in Physics*, Academic Press (1997).
- [129] M. A. H. Vozmediano, F. Juan, A. Cortijo, Journal of Physics: Conference Series **129**, 012001 (2008).
- [130] P. E. Lammert, V. H. Crespi, Phys. Rev. B **69**, 035406 (2004).

- [131] A. Kádíc, D. G. B. Edelen, *A Gauge Theory os Dislocations and Disclinations*, Springer-Verlag, Berlim-Heidelberg (1983).
- [132] F. Juan, A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano, Nucl. Phys. B, **828**, 625-637 (2010).
- [133] C. Furtado, F. Moraes, A. M. de M. Carvalho, Phys. Lett. A **372**, 5368-5371 (2008).
- [134] K. Bakke, C. Furtado, J. R. Nascimento, Eur. Phys. J. C. **60**, 501-507 (2009).
- [135] R. F. Curl, R. E. Smalley, Sci. Am. **265**, 54 (1991).
- [136] D. R. Huffman, Phys. Today **22**, November (1991).
- [137] K. Pradisses, H. Kroto, Phys. World **44**, April (1992).
- [138] Imagem extraída do site: pt.depositphotos.com
- [139] V. A. Osipov, E. A. Kochetov, JETP Letters **73**, N 10, 562-565 (2001).
- [140] M. J. Bueno, C. Furtado, A. M. M. de Carvalho, Eur. Phys. J. B, Cond. Mat. Phys. **85**, 53 (2012).
- [141] K. Bakke, A. Yu. Petrov, C. Furtado, Annals of Physics **327**, 2946-2954 (2012).
- [142] K. Bakke, C. Furtado, S. Sergeenkov, Europhys. Lett., **87**, 30002 (2009).
- [143] K. Bakke, C. Furtado, Annals of Physics **327**, 376-385 (2012).
- [144] K. Bakke, C. Furtado, Quant. Inf. Process **358** (2012).
- [145] G. Gensterblum, J. of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **81**, 89 (1996).
- [146] G. A. Galup, Chem. Phys. Lett. **187**, 187 (1991).
- [147] E. Manousakis, Phys. Rev. B **44**, 10991 (1991).
- [148] Y-L. Lin, F. Nori, Phys. Rev. B **49**, 5020 (1994).
- [149] A. C. Tang, F. Q. Huang, R. Z. Lin, Phys. Rev. B **53**, 7442 (1996).
- [150] A. Pérez-Garrido, F. Alhama, D. J. Katada, Chem. Phys. Lett. **278**, 77 (2002).
- [151] J. W. Mintmire, B. I. Dunlap, D. W. Brenner, et. al., Phys. Rev. B **43**, 14281 (1991).
- [152] Imagem extraída do site: www.matematita.it.
- [153] Imagem extraída do site: www.portaldoprofessor.mec.gov.br

- [154] Imagem extraída do site: www.pt.all-free-download.com
- [155] P. Schlüter, K. Wietschorke, W. Greiner, J. Phys. A; Math. Gen. **16**, 1999-2016 (1983).
- [156] V. A. Osipov, E. A. Kochetov, JETP Lett. **73**, 562-565 (2001).
- [157] C. Furtado, V. B. Bezerra, F. Moraes, Phys. Lett. A **289**, 160-166 (2001).
- [158] G. A. Marques, V. B. Bezerra, C. Furtado, F. Moraes, Int. J. of Mod. Phys. A **26**, 6051-6064 (2005).
- [159] J. S. Carvalho, E. Passos, C. Furtado, F. Moraes, Eur. Phys. J. C **57**, 817-822 (2008).
- [160] A. F. Nikiforov, V. B. Uvarov, *Special functions of mathematical physics*, Birkhäuser, Boston (1988).
- [161] H. Bateman, A. Erdélyi, *Higher transcendental functions*, R. E. Krieger, Malabar, Fla (1981).
- [162] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [163] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, Phys. Lett. A **96**, (7) 365 (1983).
- [164] N. Beyers, C. N. Yang, Phys. Rev. Lett **7**, 46 (1961).
- [165] F. Bloch, Phys. Rev. **137**, 787 (1965).
- [166] A. C. Bleszynski-Jayich, et. al., Science **326**, 272 (2009).
- [167] H. Bluhm, et. al., Phys. Rev. Lett. **102**, 136802 (2009).
- [168] D. V. Bulaev, V. A. Geyler, V. A. Margulus, Phys. Rev. B **69**, 195313 (2004).
- [169] K. Gödel, Rev. Mod. Phys. **21** (3), 447 (1949).
- [170] S. W. Hawking, Phys. Rev. D **46** (2), 603 (1992).
- [171] H. Monroe, Found. of Phys. **38** (11), 1065 (2008).
- [172] B. D. B. Figueiredo, I. D. Soares, J. Tiomno, Class. Quant. Grav. **9**, 1593-1617 (1992).
- [173] A. K. Raychaudhuri, S. N. Thakurta, Phys. Rev. D **22**, 802 (1980).
- [174] M. J. Rebouças, J. Tiomno, Phys. Rev. D **28** (6), 1251 (1983).
- [175] M. O. Calvão, M. J. Rebouças, A. F. F. Teixeira, W. M. Silva Jr., J. Math. Phys. **29** (5), 1127 (1988).

- [176] J. Carvalho, A. M. de M. Carvalho, C. Furtado, *Eur. Phys. J. C* **74**, 2935 (2014).
- [177] N. Drukker, B. Fiol, J. Simón, *J. Cosm. and Astropart. Phys.* **10**, 012 (2004).
- [178] P. Dirac, *Proc. R. Soc. London A* **133**, 60 (1931).
- [179] G. V. Dunne, *Ann. Phys.* **173**, 233-263 (1992).
- [180] Imagem extraída do site: www.uff.br/cdme/platonicos
- [181] Imagem extraída do site: www.forum.jogos.uol.com.br
- [182] Imagem extraída do site: www.bibliot3eca.wordpress.com
- [183] Imagem extraída do site: www.cursa.ihmc.us
- [184] Imagem extraída do site: www.es.wikipedia.org
- [185] Imagem extraída do site: www.batoco.org



Geometric model of a fullerene molecule in the presence of Aharonov–Bohm flux

Everton Cavalcante, Claudio Furtado*

Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, Caixa Postal 5008, 58051-970, João Pessoa, PB, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 25 February 2014

Received in revised form

3 May 2014

Accepted 3 June 2014

Available online 11 June 2014

Keywords:

A. Fullerene

A. Nanostructures

D. Defects

D. Electronic structure

ABSTRACT

In this study, we describe a geometric model of a fullerene molecule with I_h symmetry. We combine the well known non-Abelian monopole approach and the geometric theory of defects, where every topological defect is associated with curvature and torsion, to describe a fullerene molecule. The geometric theory of defects in solids is used to consider the topological defects that allow this molecule to form and we apply a continuum formulation to describe this spherical geometry in the presence of an external Aharonov–Bohm flux. We solve a Dirac equation for this model and obtain the eigenvalues and eigenfunction of the Hamiltonian, and we obtain the persistent current for this model and show that it depends on the geometrical and topological properties of the fullerene.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

In 1996, the Nobel Prize for chemistry was awarded to Kroto, Curl, and Smalley [1] for their discovery of a new allotrope of carbon, in which the atoms are arranged in a closed spherical shell. This allotrope became known as fullerene in tribute to the architect Buckminster Fuller who designed intriguing constructions known as shaped polyhedrons. Fullerenes are formed by carbon atoms located at the vertices of polyhedra, which can be used to produce a matrix graphene sheet with a honeycomb-like lattice arrangement. Fullerenes comprise 20 hexagonal and 12 pentagonal rings of carbon atoms based on a closed structure with I_h symmetry, which can be described by the tight-binding model [2,3]. In this context, the Fermi surface reduces to two $\mathbf{K}$ -points located in the Brillouin zone [4–6], where the conducting electrons (such as in graphene) obey an effective Dirac equation for massless fermions.

The 12 pentagonal rings exhibit defects in the spherical lattice represented by the C_{60} fullerene with I_h symmetry, which result in the presence of topological defects in this physical system. These defects can be generated conceptually by a “cut and glue” process or by a Volterra process [7]. The topological defects in solids are dislocations and disclinations, which are associated with symmetries during the generation of materials. Dislocations are associated with the translational symmetries, which are characterized by the Burgers vector, whereas disclinations are associated with

the rotational symmetries, which are characterized by the Frank vector. The general approach to these defects is represented by the theory developed by Katanaev and Volovich [8], which associates disclinations with curvature and torsion with dislocations.

In two-dimensional solids, the disclinations may be relevant in some physical systems. Recently, the physical effects of disclinations in graphene have been relatively well studied, particularly by using the Dirac equations in a curved space-time [9,10,13,11, 12,14–18] to describe the dynamics of a quasiparticle in this material. The curvature of this carbon structure induces an effective gauge field that is generated by the variation in the local reference frame [4–6,17–19]:

$$\oint \omega_\mu dx^\mu = -\frac{\pi}{6}\sigma^3, \quad (1)$$

which forces a mixture of the Fermi points ($\mathbf{K}_\pm$) and generates a non-Abelian gauge field (or a K-spin flux) that compensates for the discontinuity of the Bravais labels (A/B):

$$\oint A_\mu dx^\mu = \frac{\pi}{2}\tau^2, \quad (2)$$

where τ^2 is the second Pauli matrix that mixes the $\mathbf{K}_+$ and $\mathbf{K}_-$ components of the spinor on the $\mathbf{K}_\pm$ space.

The first geometric continuous model that used the Dirac equation to describe low-energy electrons in a fullerene molecule was proposed by Gonzales, Guinea, and Vozmediano [2,3]. In this model, a spherical geometry was used to introduce an effective field arising due to a magnetic monopole in the center by replacing the fields of 12 disclinations that characterized the I_h symmetry of the fullerene molecule. A field theory model was employed by Kolesnikov and Osipov [20], where the pentagonal

* Corresponding author. Tel.: +55 83 3216 7534.

E-mail addresses: evertoncavalcante@hotmail.com (E. Cavalcante), furtado@fisica.ufpb.br (C. Furtado).

rings in fullerene were simulated by two types of gauge field: one described the elastic properties of disclinations and the second was a non-Abelian gauge field, which described the K-spin fluxes. A series of interesting studies have used the continuous model to describe the electronic properties of spheroidal fullerenes (see Refs. [21–23]). In the present study, we use the geometric theory of defects to investigate the electronic properties of quasiparticles in a fullerene in the presence of an Aharonov–Bohm flux. We solve a Dirac equation for a spherical geometry with topological defects in the presence of an Aharonov–Bohm flux and obtain the eigenfunctions and eigenvalues for this problem.

To study the electronic properties due to the presence of topological defects in fullerenes, it is natural to formulate the Dirac equation in a curved space induced by the defect [2,3]. Thus, we consider the mapping of a fullerene in a (2+1)-spherical space-time induced by the presence of disclination defects, with a non-zero curvature ($R_{\mu\nu} \neq 0$) and without torsion ($T_{\mu\nu} = 0$), and we study the change in its spectrum when a background is introduced with a chiral magnetic string. In this study, we associate a doublet of spinors that interact with the curvature and the effective magnetic fields accumulated in the conical singularities, because a magnetic monopole in the centre of the sphere, which is represented by the mixture of $\mathbf{K}$ -points beyond the background of the string, interacts via minimal coupling with the doublet. Using this approach, we recover the results obtained recently [20,24,25] for adequate quantum numbers and we obtain the persistent currents, depending on the monopole charge (g), Fermi velocity (V_f), and the metric parameter that characterizes the presence of defects (α).

This paper is organized as follows. In Section 2, we give a brief review of the geometric approach for a fullerene molecule, where its dynamics are represented by an effective Dirac equation in curved spaces. In Section 3, we consider the presence of a magnetic chiral string and discuss how the chiral flux shifts the spectrum and how a characteristic persistent current emerges. In Section 4, we discuss the results obtained in the present study.

2. Geometric approach to a fullerene molecule

In this section, we describe the approach used to describe a fullerene molecule. We use a theoretical description of the fullerene molecule that combines two treatments: a non-Abelian monopole approach that is already very well known [2,3,20–23] and the geometric theory of defects, where the defects are associated with the source of curvature and torsion. The fullerene molecule contains 12 pentagons that are associated with disclinations, as the sources of curvature defects.

In this approach, we consider the equivalence between three-dimensional gravity with torsion and the theory of defects in solids, as described by Katanaev and Volovich [8]. Thus, the solids with topological defects can be described by their Riemann–Cartan geometry. This metric corresponds to the space-time surrounding the defect and it provides all the information required to characterize the physical system. The bases of this space-time are known as tetrads ($e_\mu^a(x)$), which are defined at each point in space-time by a local reference frame ($g_{\mu\nu}(x) = \eta_{ab} e_\mu^a e_\nu^b$). The tetrad and its inverse, ($e_\mu^a = \eta_{ab} g^{\mu\nu} e_\nu^b$), satisfy the orthogonality relationships: $e_\mu^a e^{b\mu} = \eta^{ab}$, $e_\mu^a e_b^\mu = \delta_b^a$, $e_\mu^a e_\nu^a = \delta_\nu^\mu$, and map the space-time reference frame via the local reference frame [19]:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = e_\mu^a e_\nu^b \eta_{ab} dx^\mu dx^\nu = \eta_{ab} \theta^a \theta^b, \quad (3)$$

where the Greek indices (μ, ν) run for space-time frame coordinates and the Latin indices (a, b) run for local frame coordinates. A substantial interplay between the geometry and physics of the electronic structure occurs during the study of the two-dimensional

surfaces of graphene at low energies. The models of the continuum are still limited to a few tens of eV around the Fermi point [18], but they are useful for elucidating the long-distance physics. In the geometric theory, we consider the fullerene molecule in terms of a two-dimensional spherical geometry and the metric is described by

$$ds^2 = dt^2 - r^2 d\theta^2 - \alpha^2 r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \quad (4)$$

where α is related to the angular sector λ removed (inserted) from (into) a spherical sheet in order to form the two conical defects in the sphere by the expression $\alpha = 1 \pm \lambda/2\pi$. Indeed, to respect the symmetries of the carbon network, λ can only be $\pm N\pi/3$, where N is an integer in the interval (0,6). Values of α in the interval, $0 < \alpha < 1$, mean that we remove a sector of the sphere to form two topological defects in the antipodal point. This effective geometry is considered according to Kolesnikov and Osipov [20] who noted that the eigenfunctions of the low-energy levels do not oscillate too rapidly at a distance. Using this method, we can describe the influence of the 12 pentagons in the fullerene by considering the effective metric (4). In this approach, we consider the situation near the defect.

For the local reference frame ($\theta^a = e_\mu^a(x) dx^\mu$), we choose the tetrads: $e_\mu^a(x) = \text{diag}(1, r, \alpha r \sin \theta)$. The spinor connection is defined as [19,26]:

$$\Gamma_\mu(x) = \frac{i}{4} w_{\mu ab} \Sigma^{ab} = -\frac{1}{8} w_{\mu ab} [\gamma^a, \gamma^b], \quad (5)$$

where the term $w_{\mu ab}$ is the one-form spin-connection obtained from the first of the Maurer–Cartan structure equations: $d\theta^a + w_b^a \wedge \theta^b = 0$. We obtain two non-zero contributions of the spin connection for the metric (4), which is given by

$$w_{\phi 1}^2 = -w_{\phi 2}^1 = \alpha \cos \theta. \quad (6)$$

In addition, the behavior at low energy of graphene with two distinct Fermi points at half full results in the filling of the valence band. Consequently, the quasiparticles can be described by separating the components of the doublet ($\psi^\pm$) related to the $\mathbf{K}_\pm$ points. Thus, for the (2+1)-dimension, we define the Dirac matrices $\gamma^a = \sigma^a$, where the matrix $\sigma^0 = I$ is the 2×2 identity matrix and σ^i are the usual Pauli matrices, thereby determining the pseudo-spin degrees of freedom. Therefore, the resulting spinorial connection reads as follows.

$$\Gamma_\phi(x) = \frac{i}{2} \alpha \cos \theta \sigma_3 \quad (7)$$

Next, we describe the quantum dynamics of quasiparticles in fullerene at low-energies using the effective Dirac equation [6]. Furthermore, on (2+1)-dimensional curved-spaces, we have an effective Dirac equation in a local reference frame given by

$$-i\sigma^a E_a^\mu \nabla_\mu \psi = \frac{\epsilon}{\hbar V_f} \psi, \quad (8)$$

where V_f is the Fermi velocity and ϵ are the eigenvalues of energy. We then introduce a gauge field that arises due to the $\mathbf{K}$ -spin fluxes in the fullerene. Around the 12 defects in the fullerene molecule, we employ a description where we associate a magnetic monopole to the non-Abelian fields accumulated in the conical singularities [2,3]. The 't Hooft–Polyakov monopole is situated in the center of the sphere and it is compatible with the standard quantization condition of the monopole charge [3,27]:

$$A_\phi = g \cos \theta \tau^{(2)} = \frac{3}{2} \cos \theta \tau^{(2)}, \quad (9)$$

where $\tau^{(2)}$ acts in the space of $\mathbf{K}_\pm$ spinor components. Thus, in our model, the fullerene molecule is described by a Dirac equation on the surface of a sphere with defects, which is minimally coupled to the gauge field of a monopole located at the centre of the sphere. Therefore, the quasiparticle interaction with the monopole and

geometry arises from the covariant derivative, which is given by

$$\nabla_\theta = \partial_\theta, \quad \nabla_\phi = \partial_\phi - \Gamma_\phi - ig \cos \theta \tau^{(2)}. \quad (10)$$

However, σ^a acts only on the geometry and $\tau^{(2)}$ acts only on the $\mathbf{K}$ -space. When these matrices operate in different subspaces, we can decouple the doublet. In this case, we will have a rotation in the monopole field, thus we obtain a frame where $\tau^{(2)}$ is diagonal:

$$\oint A_\mu^{\text{Rot.}} dx^\mu = A_\phi^{\text{Rot.}} = U^\dagger A_\phi U = A_\phi^k = \begin{cases} g \cos \theta & \text{if } k = (+) \\ -g \cos \theta & \text{if } k = (-) \end{cases} \quad (11)$$

where

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \quad (12)$$

Note that for $\alpha = 1$, we have a purely geometric part of a non-Abelian gauge field (9), which is the well-known non-Abelian monopole approach developed in [2,3] and applied in [20–23]. When we consider $\alpha \neq 1$ in the metric (4), the contribution of the geometric theory of the defect is combined with the non-Abelian monopole approach. Based on a rotation, we can separate the $\mathbf{K}$ -spin on the doublet. In this case, the Dirac equation is reduced to the following.

$$-i\sigma^a E_\mu^a (\partial_\mu - \Gamma_\mu - iA_\mu^k) \psi^k = \frac{e}{\hbar v_f} \psi^k \quad (13)$$

Thus, we can deal with the fullerene in the context of eigenvalue problems on the sphere with topological defects introduced by the effective geometry and the $\mathbf{K}$ -spin flux introduced by the gauge fields A_μ^k .

3. Fullerene in the presence of an Aharonov–Bohm flux tube

In this section, we consider the geometric model described by the Dirac equation (13) in the presence of Aharonov–Bohm flux. In this model, the fullerene energy spectrum can be obtained by solving a Dirac equation on the surface of a sphere where the quasi-particle interacts with the curvature and conical singularities through effective geometry and it interacts with $\mathbf{K}$ -fluxes through the 't Hooft–Polyakov monopole via a gauge principle. Next, we consider the influence of the Aharonov–Bohm magnetic flux (Φ_B) generated by a magnetic string passing through the north pole to the south pole of sphere. This is the same because the fullerene is under the influence of a magnetic field $B_z = \Phi_B \delta(r)$. This flux is associated with a vector potential in the local reference frame [28–30]:

$$A_{\phi,MS} = \frac{\Phi_B}{2\pi} \quad (14)$$

We couple this vector potential to the Dirac spinor (13) and define $\lambda = eR/\hbar v_f$, $\tilde{\partial}_\theta = \partial_\theta + \cot \theta/2$ and $\tilde{\partial}_\phi = \partial_\phi - i(\Phi_B/2\pi) - iqA_\phi^k$. The Dirac equation (13) becomes

$$\left(\sigma_1 \tilde{\partial}_\theta + \sigma_2 \frac{\tilde{\partial}_\phi}{\alpha \sin \theta} \right) \psi^k = i\lambda \psi^k, \quad (15)$$

where q is the electric charge. In order to solve the Dirac equation, we employ an *ansatz* for the spinor in the following form

$$\psi^k(\theta, \phi) = e^{im\phi} \psi_m^k(\theta), \quad (m = j + \frac{1}{2}), \quad (16)$$

thus the Dirac equation can be rewritten as

$$\left[\frac{d}{d\theta} + \left(\frac{1}{2} + k \frac{g}{\alpha} \right) \cot \theta - \frac{k}{\alpha \sin \theta} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right] \psi_m^{(k)} = i\lambda \psi_m^{(-k)}. \quad (17)$$

In this case, j is the eigenvalue of the angular momentum. Furthermore, for fermionic fields of spin- $\frac{1}{2}$, we have: $m = j \pm \frac{1}{2}$, with $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ and $m = 0, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$. Thus, we recover the

results of [20,25,24] in their respective conditions. These two equations combine to give:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \frac{\cos \theta}{\alpha} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right\} \psi_m^k = 0. \quad (18)$$

It should be noted that when $g=0$ and $\Phi_B=0$, we replicate the results reported by Imura [24], who studies the quantum of fermions in a spherical topological insulator. Furthermore, our alternative approach for finding the spectrum $\lambda(\epsilon)$ is based on changing the coordinates $x = \cos^2(\theta/2)$ and the ansatz

$$\psi_m^k = x^{C_+} (1-x)^{C_-} H_m^k(x), \quad (19)$$

with

$$C_\pm = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \pm \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right|.$$

Thus, by using the ansatz (19), we obtain an equation for $H_m^k(x)$, which is given by

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \left\{ \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right\} \right. \\ \left. + 1 - 2 \left(\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + 1 \right) x \right] \frac{d}{dx} \\ - \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right] \left(\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + 1 \right) + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \Big] H_m^k(x) = 0. \quad (20)$$

By comparing equation (20) with the standard hypergeometric equation given by

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \{ \mu + 1 - (\mu + \nu + 2)x \} \frac{d}{dx} + n(n + \mu + \nu + 1) \right] F(A, B, C, x) = 0, \quad (21)$$

we can identify the parameters μ and ν , which are given by the following expressions

$$\mu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right| \quad (22)$$

and

$$\nu = \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) - \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \right|. \quad (23)$$

We require the termination of the confluent hypergeometric series so the wave function is finite. Thus, we find the energy levels for the spinors of the Dirac quasiparticles in a fullerene molecule in the geometric approach, which is given by

$$\epsilon_{n,m}^2 = \left(\frac{V_f}{R} \right)^2 \left[\left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} \right| \right)^2 - \frac{g^2}{\alpha^2} \right]. \quad (24)$$

We should also consider the inversely proportional dependence between ϵ and R , but without changing the separation between levels. We can see that Φ_B acts as a shift in the z -component of the angular momentum in (24). In the limit where $\alpha=1$ and the Aharonov–Bohm flux is zero $\Phi_B=0$, we recover the results obtained by Kolesnikov and Osipov [20].

Next, we calculate the persistent current for our model of fullerene pierced by an Aharonov–Bohm magnetic flux. The concept of persistent currents was predicted by Buttiker [31] in 1983. It should be noted that these are not caused by outside sources, but they feature a quantum effect. The persistent current carried

by a given quasiparticle state is calculated using the Byers–Yang relation [32] given by

$$I = - \sum_{n,m} \frac{\partial \epsilon_{n,m}}{\partial \Phi_B} \Big|_{T=0}. \quad (25)$$

This relation expresses the persistent current as a derivative of the energy with respect to the magnetic flux. We now obtain the following expression for the persistent current

$$I = \frac{V_f}{2\pi\alpha R_{n,m}} \sum \frac{n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2}}{\sqrt{\left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{q\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{g^2}{\alpha^2}}}, \quad (26)$$

for $T=0$. Note that the persistent current depends on the parameters α and g , which characterize the presence of topological defects.

4. Conclusion

To conclude, we formulated a self-consistent geometric model for C_{60} fullerenes with Ih symmetry, which is described by a two-dimensional sphere using the geometric theory of defects. In this model, we combine the non-Abelian monopole approach [2,3,20–23] with the geometric theory of defects, where every topological defect is associated with curvature. We proposed an effective metric to describe the conical singularities introduced by 12 disclination in fullerene molecules and a spherical metric with effective conical defects is used to consider the influence of the distortions caused by disclinations in the fullerene molecule. This model is valid because it is well known [20] that the eigenfunctions of quasiparticles for small quantum levels do not oscillate too rapidly with distance. Thus, in this continuous approximation, we can describe the quasiparticles near the disclinations using the metric given by Eq. (3). The $\mathbf{K}$ -spin influence is introduced by a 't Hooft–Polyakov monopole in the centre of the spherical space according to a method described previously [2,3]. We obtained the eigenfunctions and eigenvalues for this problem in the presence of an Aharonov–Bohm flux. In the limit where $\alpha = 1$ and $\Phi_B = 0$, we obtained the results reported previously by [3,20,24]. We calculated the persistent current and demonstrated that it depends on the parameters that characterize the topological defects. Finally, we obtained a geometric model that describes a fullerene molecule where the distortions caused by 12 disclinations in this molecule are introduced via a spherical metric with conical singularities and the $\mathbf{K}$ -spin is introduced by a monopole in the

centre of the sphere. Using Byers–Yang [32] relations, we calculated the persistent current for a fullerene molecule pierced by an Aharonov–Bohm flux. We found that Eq. (26), where the current persistent depends on the parameters g and α , characterizes the presence of topological defects.

Acknowledgments

We thank CAPES, CNPQ, CAPES/NANOBIOTEC, and FAPESQ for financial support.

References

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley, *Nature* 318 (1985) 162.
- [2] J. Gonzalez, F. Guinea, M.A.H. Vozmediano, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 1.
- [3] J. Gonzalez, F. Guinea, M.A.H. Vozmediano, *Nucl. Phys. B* 406 (1993) 771.
- [4] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009).
- [5] M.A.H. Vozmediano, M.I. Katsnelson, F. Guinea, *Phys. Rep.* 496 (2010) 109.
- [6] J.K. Pachos, *Contemp. Phys.* 50 (2009) 375.
- [7] M. Klemm, *Points, Lignes, Parois: Dans Les Fluides Anisotropes et les Solides Cristallins*, Editions de Physique, France, 1977.
- [8] M.O. Katanaev, I.V. Volovich, *Ann. Phys. (N.Y.)* 216 (1992) 1.
- [9] C. Furtado, F. Moraes, A.M. de M. Carvalho, *Phys. Lett. A* 372 (2008) 5368.
- [10] K. Bakke, C. Furtado, S. Sergeenkov, *Europhys. Lett.* 87 (2009) 30002.
- [11] K. Bakke, A.Yu. Petrov, C. Furtado, *Ann. of Phys. (N.Y.)* 327 (2012) 2946.
- [12] A.M. de M. Carvalho, C.A. de Lima Ribeiro, F. Moraes, C. Furtado, *Eur. Phys. J. Plus* 128 (2013) 6.
- [13] M.J. Bueno, C. Furtado, A.M.M. de Carvalho, *Eur. Phys. J. B, Cond. Mat. Phys.* 85 (2012) 53.
- [14] K. Bakke, C. Furtado, *Phys. Rev. A* 87 (2013) 012130.
- [15] K. Bakke, C. Furtado, *Phys. Lett. A* 376 (2012) 1269.
- [16] G.A. Marques, V.B. Bezerra, C. Furtado, F. Moraes, *Int. J. Mod. Phys. A* 20 (2005) 6051.
- [17] P.E. Lammert, V.H. Crespi, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 5190.
- [18] P.E. Lammert, V.H. Crespi, *Phys. Rev. B* 69 (2004) 035406.
- [19] N.D. Birrell, P.C.W. Davies, *Quantum Fields in Curved Spaces*, Cambridge, 1982.
- [20] D.V. Kolesnikov, V.A. Osipov, *Eur. Phys. J. B* 49 (2006) 465.
- [21] M. Pudlak, R. Pincak, V.A. Osipov, *Phys. Rev. A* 75 (2007) 025201.
- [22] M. Pudlak, R. Pincak, V.A. Osipov, *Phys. Rev. A* 75 (2007) 065201.
- [23] R. Pincak, *Phys. Lett. A* 340 (2005) 267.
- [24] K. Imura, Y. Yoshimura, Y. Takane, T. Fukui, *Phys. Rev. B* 235119 (2012).
- [25] A.A. Abrikosov, Jr., *hep-th/0212134*.
- [26] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Institute of Physics Publishing, Bristol, 1998.
- [27] S. Coleman, *The Magnetic Monopole Fifty Years Later*, in *The Unity of Fundamental Interactions*, Plenum, New York, 1983.
- [28] J.S. Carvalho, E. Passos, C. Furtado, F. Moraes, *Eur. Phys. J. C* 57 (2008) 817.
- [29] C. Furtado, V.B. Bezerra, F. Moraes, *Phys. Lett. A* 289 (2001) 160–166.
- [30] G.A. Marques, C. Furtado, V.B. Bezerra, F. Moraes, *Int. J. Mod. Phys. A* 20 (2005) 6051.
- [31] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, *Phys. Lett. A* 96 (7) (1983) 365.
- [32] N. Byers, C.N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* 7 (1961) 46.

Geometric approach for the C_{60} fullerenes in a Gödel-type spacetime

Everton Cavalcante*

*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba,
Caixa Postal 5008, 58051-970, João Pessoa, PB,
Brazil; Centro de Ciências Exatas e Sociais Aplicadas,
Universidade Estadual da Paraíba, Patos, PB, Brazil*

Claudio Furtado†

*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba,
Caixa Postal 5008, 58051-970, João Pessoa, PB, Brazil*

Josevi Carvalho‡

*Unidade Acadêmica de Tecnologia de Alimentos,
Centro de Ciências e Tecnologia Agroalimentar,
Universidade Federal de Campina Grande,
Pereiros, Pombal, PB 58840-000, Brazil*

Abstract

In this contribution, some considerations about the geometric approach of the fullerene molecule with Ih symmetry are considered. We assume the quantum dynamics of a quasiparticles in continuum limit inside a spherical solution of the a Gödel-type space-time. Thus we study the molecule in a rotation frame. Also we combine the know non-Abelian monopole approach with a Aharonov-Bohm flux like a underflow. Where every topological defects is associated with curvature and torsion. The energy levels and the persist current are obtained, and we show that it depends on the geometrical and topological properties of the fullerene. As well as we recovered the well-know results for limiting cases.

PACS numbers: F,G,H

Keywords: fullerene, geometric theory of defect, Dirac equation in curved space

* Electronic address: everton@ccea.uepb.edu.br

† Electronic address: furtado@fisica.ufpb.br

‡ Electronic address: josevi@ccta.ufcg.edu.br

I. INTRODUCTION

Since the advent of the theory of relativity it was clear that the time has ceased to be a mere mechanical parameter, which ensures the classical causality, to gain the status of coordination in space-time. Thus the notion of physical event has become a purely geometrical concept. Thereby we can talk about a particle literally walking along the coordinate of time. However also know that in everyday events (irreversible process) the entropy in universe tends to increase. Preventing the particle perform the way back in time-coordinated. Ensuring causality as one of the most pragmatic scientific notions.

Even as a congruent concept, causality remains a recurring research subject in physics. For example in the QED the own antiparticles are described by Feynman diagrams exactly like particle. With the exception of travelling in the opposite direction of time [1]. Description that works very well in nearness where happen scattering and creation and annihilation pair processes.

Furthermore in general relativity there are several solutions of Einstein's equations that enable closed time-like curves (CTCs). One of the most important these solutions is the Gödel metric [2], representing the first cosmological solution with rotating matter. Inducing to exciting, however premature, idea of the possibility of the time travel. Once the existence of closed time-like curves would make it possible for a future event influence on a past event. However, in 1992 Hawking [3] conjectured that the presence of CTCs is physically inconsistent with arguments about divergences in energy density for time travels with a short time intervals; in the greatness of Planck scale ($\sim 10^{-44}$ seconds). Thus requiring a greater understanding of quantum gravity. Or even at physics, at least as we know, tends to prevent any kind of time machine. Another interesting speculation is made by Monroe [4] when assumes that CTCs should undergo some horizon of a black hole. Thus preventing the detection of causal violation by a given observer.

In the 80s, three works [5–7] examined in more detail about the problem of causality in the Godel-type solutions in Einstein's equations. In them it's possible to distinguish three different classes of solutions when we study the problem in cylindrical coordinates:

$$ds^2 = -[dt + H(r)d\phi]^2 + D^2(r)d\phi^2 + dr^2 + dz^2. \quad (1)$$

Wherein $H = \frac{\Omega}{l^2} \sinh^2(lr)$, and $D = \frac{1}{2l} \sinh(2lr)$. Where Ω and l are real constants. Also $\Omega = \frac{H'}{2D}$ and $l^2 = \frac{D''}{4D}$ are necessary conditions [8] for the homogeneity of space-time. Also [5–7] show that these conditions are not only necessary, but are sufficient for homogeneity. Since there are at least

five linearly independent Killing vectors. The presence of CTCs is related to the behavior of the function: $G(r) = D^2(r) - H^2(r)$. So, if $G(r)$ is negative at a given limited region, this region will have CTCs. We are three possibilities: (i) there are no CTCs, or $l^2 \geq \Omega^2$, (ii) there is an infinite sequence of alternating causal and non-causal regions, or $l^2 < 0$, and (iii) there is only one non-causal region, or $0 \leq l^2 < \Omega^2$.

Can it also define three classes of solutions in metric as the symmetry of space-time with surfaces of constant curvature: (i) flat solutions, or rotation cosmic string, when $l^2 = 0$, (ii) solutions with positive spherical curvature when $l^2 < 0$, (iii) and hyperbolic solutions when $l^2 > 0$. Different aspects of the Gödel solutions are discussed also in [9–13].

Recently, the geometric approach of defects in solids was used to consider the topological defects that allow the C_{60} molecule form like a curvature in spherical symmetrical spaces in the presence of an external Aharonov-Bohm flux [14]. These defects are from the twelve pentagonal rings in the spherical lattice represented by the C_{60} fullerene with Ih symmetry, which can be described by the tight-binding model [15, 16]. In this context, the Fermi surface reduces to two **K**-points located in the Brillouin zone [17, 19, 35], where the conducting electrons (such a graphene) obey an effective Dirac equation for massless fermions. Usually these defects are associated with breaking symmetries during the generation of materials [20]. Dislocations are associated with the translational symmetries and disclinations, obviously more relevant in bidimensional structures, are associated with the rotational symmetries. Conceptually they are formed by a Volterra processes [21]. And the general approach is represented by the Katanaev and Volovich theory [22]. In the cosmological context we have an example of defects: domain walls [23], cosmic strings [24, 25] and global monopoles [26]. Already ferromagnetism, liquid crystals and spin ices are related to defects in the spin structure (disclinations) of the medium [27–29].

Fullerenes are made up of 20 hexagonal and 12 pentagonal rings of carbon atoms based on a closed structure with Ih symmetry. That is, we can build a Ih symmetric fullerene from the honeycomb lattice graphene matrix with disclinations. Where the physical effects of disclinations have been studied in approach of the Dirac equation in a curved space-time to describe the dynamics of a quasiparticle in this material [30–34]. Also has been well known that the curvature of this carbon lattice induces an effective gauge field that is generated by the variation in the local reference frame [19, 35–37]

$$\oint \omega_\mu dx^\mu = -\frac{\pi}{6} \sigma^3, \quad (2)$$

which force a mixture of the Fermi points ($\mathbf{K}_{\pm}$) and generates a non-Abelian gauge field (or K-spin flux) that compensates for the discontinuity of the Bravais labels (A/B):

$$\oint A_{\mu} dx^{\mu} = \frac{\pi}{2} \tau^2. \quad (3)$$

Knowing that τ^2 is the second Pauli matrix that mixes the $\mathbf{K}_{+}$ and $\mathbf{K}_{-}$ components of the spinor on the $\mathbf{K}_{\pm}$ space. In other words, the mixture of Fermi points induces an effective field arising due to a fictitious magnetic monopole in the center of the Ih fullerene by replacing the fields of 12 disclinations.

In this contribution, we associate a doublet of spinors interacting with a characteristic curvature of space and with a curvature accumulate in a pentagonal defects (conical singularities) via gauge field (A_{μ}) from the fictitious magnetic monopole. In order to put the contents of matter under rotation, we assume the mapping of a Ih fullerene in a spherical solution ($l^2 < 0$) of a Gödel-type space-time, and we study the change in spectrum of the C_{60} molecule when a background is introduced with a chiral magnetic string. This paper is organized as follows. In Section 2, we give a brief review of the geometric approach for a fullerene molecule, where it's dynamics are well been represented by an effective Dirac equation in a curved spaces. And we establish how to put this content of matter under rotation through a model of continuous in the spherical Gödel-type metric. In Section 3, we consider the presence of a magnetic chiral string and discuss how the chiral flux shifts the spectrum, how a characteristic persistent current emerges and compare how the non-inertial characteristics change the spectrum and persistent current. In Sections 4, we discuss the results obtained in the present study.

II. GEOMETRIC APPROACH TO A FULLERENE MOLECULE IN A NON-INERTIAL FRAME

In this section we describe the approach used to describe a fullerene molecule in a non-inertial frame. For this we consider the mapping of a fullerene under rotation in a space-time with spherical symmetry descendant of a Gödel-type solution of the Einstein's equations. In this space-time the conical singularities induced a non-zero curvature in space. So, we combine two treatments: a non-Abelian monopole approach that is already very well know [15, 16] and the geometry theory of defects [22]. Which is made equivalence between three-dimensional gravity with torsion and the theory of defects in solids. Thus, the molecule with conical singularities can be described by a

Riemann-Cartan geometry. The choice of one spherical Gödel-type solution is motivated because it represents a cosmological solution where the content material is under rotation. It is interesting to note that the relationship between the geometric approach and the physics of the electronic structure of the molecule is well described at low energies, around a few tens of eV around the $\mathbf{K}$ -points. Still it is useful for elucidating a long-distance physics, since we note that the eigenfunctions of the low-energy levels do not oscillate too rapidly at a distance [38]. That is, we consider the situation in the neighbourhood the defects. In this geometric approach, we consider the fullerene molecule under rotation in terms of a two-dimensional spherical geometry with a vorticity (Ω), where the metric is described by

$$ds^2 = -\left(dt + \alpha\Omega\frac{\sinh^2(lr)}{l^2}d\phi\right)^2 + \alpha^2\frac{\sinh^2(2lr)}{4l^2}d\phi^2 + dr^2 + dz^2, \quad (4)$$

where the variables (r, ϕ, z, t) can take, respectively, the following values: $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$, $-\infty < (z, t) < \infty$, and α is related to the angular sector λ removed (inserted) from (into) a spherical sheet in order to form the two conical defects in the sphere by the expression $\alpha = 1 \pm \lambda/2\pi$. Indeed, to respect the symmetries of the carbon network, λ can only be $\pm N\pi/3$, where N is an integer in the interval $(0, 6)$. Values of α in the interval, $0 < \alpha < 1$, mean that we remove a sector of the sphere to form two topological defects in the antipodal point. Also, we can note that presence of defects do not change the conditions for existence of CTCs in the metrics [3]. And that the spherical symmetric solutions ($l^2 < 0$) inside the causal regions ($l^2 \geq \Omega^2$), that is no CTCs, imply in a imaginary vorticity ($\Omega^2 < 0$). So that does not make sense. To overcome this problem, we admit that our approach works very well in one of the causal regions within the set of solutions $l^2 < 0$. Where exist an infinite sequence of a alternating causal and non-causal regions. As we are studying the fullerene like a C_{60} buckyball, it is appropriate to do $dz = 0$ and we introduce the new convenient coordinates: $R = i/2l$ and $\theta = r/R$. Resulting in

$$ds^2 = -\left(dt + 4\alpha\Omega R^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)d\phi\right)^2 + R^2(d\theta^2 + \alpha^2 \sin^2\theta d\phi^2) \quad (5)$$

It is noteworthy that we are adopting natural units $c = \hbar = G = 1$. Also, that when we consider $\Omega = 0$ and $\alpha = 1$, the metric reduces to the Minkowski one. And when $l^2 = \Omega^2/2$ and $\alpha = 1$ we recovered the original solution obtained by Gödel [2]. This metric correspond to the space-time surrounding the defect and it provides all the informations required to characterize the physical system. The bases of this space-time are known as tetrads ($e^a_\mu(x)$), which are defined at each

point in space-time by a local reference frame ($g_{\mu\nu}(x) = \eta_{ab}e^a_\mu e^b_\nu$). The tetrad and it's inverse, ($e^\mu_a = \eta^{ab}g^{\mu\nu}e^b_\nu$), satisfy the orthogonal relationships: $e^a_\mu e^{b\mu} = \eta^{ab}$, $e^a_\mu e^b_\mu = \delta^a_b$, $e^\mu_a e^\mu_b = \delta^\mu_b$, and map the space-time reference frame via the local reference frame [39]:

$$ds^2 = g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu = e^a_\mu e^b_\nu \eta_{ab}dx^\mu dx^\nu = \eta_{ab}\theta^a\theta^b, \quad (6)$$

where the Greek indices (μ, ν) run for space-time frame coordinates and the Latin indices (a, b) run for local frame coordinates. For the local reference frame ($\theta^a = e^a_\mu(x)dx^\mu$), we choose the tetrads:

$$e^a_\mu = \begin{pmatrix} e^0_t & e^0_\theta & e^0_\phi \\ e^1_t & e^1_\theta & e^1_\phi \\ e^2_t & e^2_\theta & e^2_\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4\alpha\Omega R^2 \sin^2(\frac{\theta}{2}) \\ 0 & R & 0 \\ 0 & 0 & \alpha R \sin \theta \end{pmatrix}. \quad (7)$$

The one-form or spin connections ($\omega_\mu^a{}_b$) are obtained by the variation of the local reference frame along the a closed curve, δe^a_μ . Namely

$$\omega_\mu^a{}_b = -e^a_\beta (\partial_\mu e^\beta_b + \Gamma^\beta_{\mu\nu} e^\nu_b), \quad (8)$$

where $\Gamma^\beta_{\mu\nu}$ are the Christoffel symbols. Another most immediate way to obtain the one-form connection is through the first of the Maurer-Cartan structure equations:

$$d\theta^a + \omega^a{}_b \wedge \theta^b = 0. \quad (9)$$

For the one-forms we get the following connections ($\omega^a{}_b = \omega_\mu^a{}_b dx^\mu$): $\omega_\phi^0{}_1 = -\omega_\phi^1{}_0 = 2\alpha\Omega R \sin \theta$, $\omega_\phi^2{}_1 = -\omega_\phi^1{}_2 = \alpha \cos \theta$, and $\omega_\theta^0{}_2 = -\omega_\theta^2{}_0 = 2\Omega R$. Thus the spinorial connections ($\Gamma_\mu(x) = \frac{i}{4}\omega_{\mu ab}\Sigma^{ab}$), are described to the components of the doublet related to the **K**-points how a matrix in $(2+1)$ -dimensions. Where the Dirac matrices γ^a are reduced in our case to the Pauli matrices $\gamma^a = \sigma^a$, and the matrix $\sigma^0 = I$ is the 2×2 identity matrix, thereby determining the pseudo-spin degrees of freedom. So, the resulting spinorial connections reads as follows:

$$\begin{cases} \Gamma_\phi = \frac{i}{2}(\alpha \cos \theta \sigma_3 - \alpha\Omega R \sin \theta \sigma_2) \\ \Gamma_\theta = i\Omega R \sigma_1 \end{cases} \quad (10)$$

Next, we solve the Dirac equation on the surface of a sphere with a fictitious magnetic monopole at its center. The charge g of the fictitious magnetic monopole is adjusted by adding up the individual fluxes of all the lines:

$$g = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \frac{\pi}{2} = \frac{N}{8}. \quad (11)$$

Where N being the number of conical singularities on the surface. Note that for the buckyball C_{60} , the structure is that of a truncated icosahedron (where $N = 12$). Thus we have $g = \frac{3}{2}$, which is compatible with the standard quantization condition of the monopole charge [16, 40]. The spectrum is obtained by solving the covariant Dirac operator

$$-i\sigma^a e_a^\mu (\nabla_\mu - iA_\mu)\psi = 0, \quad a = 0, 1, 2, \quad \mu = t, \theta, \phi, \quad (12)$$

knowing that $\nabla_\mu = \partial_\mu - \Gamma_\mu$. In such way that a non-Abelian gauge field (A_μ) that arises due to the $\mathbf{K}$ -spin fluxes. This 't Hooft-Polyakov monopole must be compatible with the standard quantization condition of the monopole charge, and it is well reported by

$$A_\phi = g \cos \theta \tau^{(2)} = \frac{3}{2} \cos \theta \tau^{(2)}. \quad (13)$$

Furthermore, it is noteworthy that $\tau^{(2)}$ acts only in the space of $\mathbf{K}_\pm$ spinor components, while σ^a , existing in spinorial connection (Γ_μ), only acts on the geometry. When these matrices operate in different subspaces, we can decouple the doublet ($\psi^\pm$). In this case we will have a rotation in the monopole field, thus we obtain a frame where $\tau^{(2)}$ is diagonal:

$$\oint A_\mu^{Rot.} dx^\mu = A_\phi^{Rot.} = U^\dagger A_\phi U = A_\phi^k = \begin{cases} g \cos \theta, & \text{if } k = (+) \\ -g \cos \theta, & \text{if } k = (-) \end{cases} \quad (14)$$

where

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \quad (15)$$

Based on a rotation, we can separate the $\mathbf{K}_\pm$ pseudo-spin components on the doublet. In this case (12) is reduced to the following

$$-i\sigma^a e_a^\mu (\partial_\mu - \Gamma_\mu - iA_\mu^k) \psi^k = 0 \quad (16)$$

Hence we can work our problem in context of eigenvalues problem just by explicitly the quantum numbers for ∂_t and ∂_ϕ . That is we employ an *ansatz*: $\psi^k(t, \theta, \phi) = \exp(-i\epsilon t) \exp(im\phi) \psi_{n,m}^k(\theta)$. However, before that, let's consider the influence of the Aharonov-Bohm magnetic flux (Φ_B) generated by a magnetic string passing through the north pole to the south pole of sphere.

III. ADDING THE AHARONOV-BOHM FLUX TUBE

In this section, we consider the geometric model described by the Dirac equation (16) in the presence of Aharonov-Bohm flux. This flux represents a magnetic string that goes from pole to pole in the C_{60} buckyball. This is the same as assuming the molecule under the influence of a magnetic field $B_z = \Phi_B \delta(r)$. This flux is associated with a vector potential in the local reference frame by [14, 41, 42]

$$A_{\phi,MS} = \frac{\Phi_B}{2\pi}. \quad (17)$$

Thus, after replacing the inverse of the tetrads (e_a^μ) and spinorial connections ($\Gamma_\mu(x)$), and considering $\lambda = \epsilon R$, we find

$$\left[\frac{d}{d\theta} + \left(\frac{1}{2} + k \frac{g}{\alpha} \right) \cot \theta - \frac{k}{\alpha \sin \theta} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + 4\alpha\Omega\lambda \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \right] \psi_{n,m}^{(k)} = i\lambda \psi_{n,m}^{(-k)} \quad (18)$$

Note that we explicit the ϕ -coordinate quantum number ($m = j \pm \frac{1}{2} = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots$) and the stationary character of the problem (energy spectrum (λ)) through the *ansatz*: $\psi^k(t, \theta, \phi) = \exp(-i\epsilon t) \exp(im\phi) \psi_{n,m}^k(\theta)$. Also, when $\Omega = 0$ we recover the inertial case described in references [14, 38, 43, 44] in their respective conditions. These two components of the doublet ($\psi_{n,m}^\pm$) combine to give:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 - \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \frac{\cos \theta}{\alpha} + \frac{g}{\alpha} \left(\frac{g}{\alpha} + k \right) + \frac{1}{4} \right] + \lambda^2 - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} - 4\Omega\lambda \frac{\sin^2 \theta / 2}{\sin \theta} \left[k + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} - g \cos \theta \right) + 4\Omega\lambda \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \right\} \psi_{n,m}^k = 0 \quad (19)$$

We will follow the same way as in [14]. That is to say that the asymptotic limits do not change when the matter contents is in rotation. Moreover, our alternative approach for finding the spectrum $\lambda(\epsilon)$ is based on changing the coordinates $x = \cos^2(\theta/2)$ and the *ansatz*

$$\psi_m^k = x^{C+}(1-x)^{C-} H_{n,m}^k(x), \quad (20)$$

with

$$C_{\pm} = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \pm \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) \mp \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right|. \quad (21)$$

Thus, after replacing the *ansatz* (20), we obtain an equation for $H_{n,m}^k(x)$, which is given by

$$\begin{aligned} & \left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \left\{ \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2g}{\alpha} \right) - \frac{\Omega}{2\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right\} + 1 + \right. \\ & - 2 \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) x \left. \right\} \frac{d}{dx} - \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| \left(\left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + 1 \right) + \right. \\ & \left. + (1 - 8\Omega^2) \lambda^2 - 2\Omega \lambda \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right] - \frac{1}{4} + \frac{g^2}{\alpha^2} \right] H_{n,m}^k(x) = 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Note that equation (22) is very similar the standard hypergeometric equation given by

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + \{ \mu + 1 - (\mu + \nu + 2)x \} \frac{d}{dx} + n(n + \mu + \nu + 1) \right] F(A, B, C, x) = 0 \quad (23)$$

Indeed, to ensure the finiteness of the wave function, it is imperative that (22) behave as a confluent hypergeometric series. Thus, it is possible to compare (22) to (23), provided that

$$(1 - 8\Omega^2) \lambda^2 - 2\Omega \left[1 + \frac{2}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} + g \right) \right] \lambda - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{g^2}{\alpha^2} = 0. \quad (24)$$

Thereby, we find the spectrum for the particles in model by solving (24), resulting in

$$\begin{aligned} \epsilon_{n,m} = & \frac{1}{2R(1 - 8\Omega^2)} \left\{ 4\Omega \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right] + \right. \\ & \left. \pm 2 \sqrt{2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right]^2 \Omega^2 - (1 - 8\Omega^2) \left[\frac{g^2}{\alpha^2} - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (25)$$

It is interesting to note that for $\Omega = 0$ we restore the inertial case [14]. Moreover, it is worth noting that the inversely proportional dependence between $\epsilon_{n,m}$ and R do not change the separation between levels. In fact Φ_B operate as a shift in the z -component of the angular momentum. Also we should be noted that when $\alpha = 1$, $\Phi_B = 0$ and $\Omega = 0$, we recover the results obtained by Kolesnikov and Osipov [38]. Also, when $g = 0$ and $\Phi_B = 0$, we replicate the approach stated by Imura [43], for a dynamics of the fermions in a spherical topological insulator.

Next, we calculate the persistent current for our model of fullerene drilled by a chiral magnetic string. Indeed, persistent currents were first observed in superconducting rings [45]. This while studying the transition around the critical temperature under the influence of an external magnetic field. Then observed a residual current after removing the external field. It should be noted that these persistent currents are not caused by outside sources, but they feature a quantum effect, and are not a superconducting purpose only, but may exist in conductive materials. It is calculated using the Byers-Yang relation [46] given by

$$I = - \sum_{n,m} \left. \frac{\partial \epsilon_{n,m}}{\partial \Phi_B} \right|_{T=0}. \quad (26)$$

This relation express the persistent current for $T = 0$ as a derivative of the energy with respect to the magnetic flux of the chiral string. We now obtain the following expression for the persistent current

$$I = \frac{1}{2\pi\alpha R(1-8\Omega^2)} \sum_{n,m} \left\{ 2\Omega + \right. \\ \left. (1-8\Omega^2) \left[n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right] + 2\Omega^2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right] \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{2 \left[\frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) + \frac{1}{2} + \frac{g}{\alpha} \right]^2 \Omega^2 - (1-8\Omega^2) \left[\frac{g^2}{\alpha^2} - \left(n + \left| \frac{1}{\alpha} \left(m - \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) \right| + \frac{1}{2} \right)^2 \right]}}{2} \right\}. \quad (27)$$

Note that the persistent current depends on the parameters α and g , which characterize the presence of topological defects, as well as we recover the inertial case [14] when $\Omega = 0$.

IV. CONCLUSION

We have suggest a possibility to describe the C_{60} fullerenes with the matter contents on rotation within the continuum field-theory approach. For this we mapping the C_{60} fullerenes with Ih

symmetry in a two-dimensional spinning sphere like a homogeneous Gödel-type spherical symmetric solution for Einstein equation [2, 5–7]. Using thus the description of the molecule in a non-inertial reference frame by means of well known geometric theory Katanaev-Volovich [22] of defects and the non-Abelian monopole approach [15, 16]. So, we assume all 12 conical singularities of the molecule described by a Gödel-type metric. Having thus according to the Osipov-Kolesnikov model [38], where eigenfunctions of the quasiparticles for small quantum levels do not oscillate too rapidly with distance. Also, we assume that our description works well of in causal regions within the set of solutions $l^2 < 0$ thereby avoiding an imaginary vorticity $\Omega^2 < 0$. Finally, our contribution naturally leads to additional terms in energy levels of the quasiparticles and current persists observed in the molecule. As well as, when compared with the different approaches about inertial frames [38, 43, 44], the limits are well recovered.

Acknowledgements

We thanks to CAPES, CNPQ, CAPES/NANOBIOTEC and FAPESQ for financial support.

-
- [1] F. Mandl, G. Shaw, *Quantum Field Theory*, Second Edition, Wiley (2010).
 - [2] K. Gödel, Rev Mod. Phys. **21** (1949) 447.
 - [3] S. Hawking, Phys. Rev. D **46** (1992) 603.
 - [4] H. Monroe, Found. of Phys. **38** (11) (2008) 1065.
 - [5] M. Rebouças, J. Tiomno, Phys. Rev. D **28**(1983) 1251.
 - [6] M. Rebouças, M. Aman, A. F. F. Teixeira, J. Math. Phys. **27** (1985) 1370.
 - [7] M. O. Galvão, M. Rebouças, A. F. F. Teixeira, W. M. Silva Jr, Math. Phys. **29** (1988) 1127.
 - [8] A. K. Raychaudhuri, S. N. Thakurta, Phys. Rev. D **22** (1980) 802.
 - [9] J. D. Barrow, C. Tsagas, Class. Quantum Gravity **21** (2004) 1773.
 - [10] J. D. Barrow, C. Tsagas, Phys. Rev. D **69** (2004) 064007.
 - [11] T. Clifton, J. Barrow, Phys. Rev. D **72**(2005) 123003.
 - [12] R. J. Gleiser, M. Gurses, A. Karasu, S. Özgür, Class. Quantum Gravity **23** (2006) 2653.
 - [13] J. Carvalho, A. M. de M. Carvalho, C Furtado, Eur. Phys. J. C **74** (2014) 2935.
 - [14] E. Cavalcante, C. Furtado, J. Phys. and Chem. of Solids **75** (2014) 1265-1268.
 - [15] J. Gonzalez, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. Lett. **69** (1992).
 - [16] J. Gonzalez, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, Nucl. Phys. B **406** (1993) 771.
 - [17] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81** (2009).
 - [18] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea, Phys. Rep. **496** (2010) 109.
 - [19] J. K. Pachos, Contemp. Phys. Rep. **50** (2009) 375.
 - [20] T. Vachaspati, Phys. Rev. D **44** (1991) 3723.

- [21] M. Kleman, *Points, Lignes, Parois: Dans Les Fluides Anisotropes et les Solides Cristallins*, Editions de Physique, France, (1977).
- [22] M. O. Katanaev, I. V. Volvich, Ann. Phys. (NY) **216** (1992) 1.
- [23] T. W. B. Kibble, J. Phys. A **9** (1976) 1387.
- [24] A. Vilenkin, Phys. Rev. D **23** (1981) 852.
- [25] B. Linet, Phys. Rev. D **33** (1986) 1333.
- [26] M. Barriola, A. Vilenkin, Phys. Rev. Lett. **63**(1976) 341.
- [27] F. C. Frank, *On the theory of liquid crystals*, Discussion Farad. Soc. **25** (1958) 19-28.
- [28] I. E. Dzyaloshinskii, G. E. Volovich, Physique **39(6)** (1978) 693-700.
- [29] J. A. Hertz, Phys. Rev. B **18** (1978) 4875-4885.
- [30] C. Furtado, F. Moraes, A. M. de M. Carvalho, Phys. Lett. A **372** (2008) 5368.
- [31] A. M. de M. Carvalho, C. A. de Lima Ribeiro, F. Moraes, C. Furtado, Eur. Phys. J Plus **128** (2013) 6.
- [32] M. J. Bueno, C. Furtado, A. M. de M. Carvalho, Eur. Phys. J. B, Cond. Mat. Phys **85** (2012) 53.
- [33] K. Bakke, C. Furtado, Phys. Rev. A **87** (2013) 012130.
- [34] G. A. Marques, V. B. Bezerra, C. Furtado, F. Moraes, Int. J. Mod. Phys. A **20** (2005) 6051.
- [35] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea, Phys. Rep. **496** (2010) 109.
- [36] P. E. Lammert, V. H. Crespi, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 5196.
- [37] P. E. Lammert, V. H. Crespi, Phys. Rev. B **69** (2004) 035406.
- [38] D. V. Kolesnikov, V. A. Osipov, Eur. Phys. J. B **49** (2006) 465.
- [39] N. D. Birrel, P. C. W. Davies, *Quantum Fields in Curved Spaces*, Cambridge (1982).
- [40] S Coleman, *The Magnetic Monopole Fifty Years Later, in The Unity of Fundamental Interactions*, Plenum, New York (1983).
- [41] C. Furtado, V. B. Bezerra, F. Moraes, Phys. Lett. A **289** (2001) 160-166.
- [42] J. S. Carvalho, E. Passos, C. Furtado, F. Moraes, Eur. Phys. J. C **57** (2008) 817.
- [43] K. Imura, Y. Yoshimura, Y. Takane, T. Fukui, Phys. Rev. B (2012) 235119.
- [44] A. A. Abrikosov, Jr., hep-th/0212134.
- [45] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, Phys. Lett. A **96(7)** (1983) 365.
- [46] N. Byers, C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **7** (1961) 46.