UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº17.228 de 25/11/2016
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXV SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS
SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2021

ESTUDO DAS FASES GEOMÉTRICAS EM MEIOS COM DEFEITOS TOPOLÓGICOS E SUAS APLICAÇÕES AO GRAFENO

João Carlos dos R. C. de Oliveira[1]; Carlos Alberto de Lima Ribeiro[2]
1. Bolsista PROBIC, Graduando em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: jcgenius19@gmail.com
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: calr@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Defeitos Topológicos; Fases Geométricas; Grafeno.

INTRODUÇÃO

Os estudos em Defeitos Topológicos e das Fases Geométricas, também conhecidas como Fases de Berry, têm atraído forte interesse dos físicos. Nesse sentido, estudamos inicialmente a origem da Fase Geométrica. Em seguida, e já no contexto dos Defeitos Topológicos, foi calculada a Fase de Berry para um meio com a presença de um Defeito do tipo Deslocação. Por fim, discutimos a presença de Defeitos Topológicos no Grafeno, material de grande potencial tecnológico.

As Fases Geométricas possuem uma relação íntima com processos adiabáticos. Nesse sentido, um sistema tal como o pêndulo de Foucault, o qual não retorna ao seu estado inicial quando transportado ao redor de um ciclo fechado, é chamado de não-holonômico. Na Mecânica Clássica um sistema é dito holonômico se as restrições do sistema puderem ser escritas apenas como função dependente das coordenadas espaciais e do tempo.

De fato, sistemas não-holonômicos estão presentes em praticamente todas as máquinas cíclicas, de modo que, toda máquina cíclica é um dispositivo não holonômico. Neste sentido, o Pêndulo é tido como um exemplo de aplicação do ângulo de Hannay, o qual é tido como análogo clássico das Fases de Berry (GRIFFITHS, 2005). Chama-se Fase Geométrica a curva:

$$\gamma_n(t) \equiv i\int_0^t \left\langle \psi_n(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \right\rangle dt' \qquad (1)$$

Por sua vez, o Grafeno é uma camada única (monocamada) de átomos de carbono, fortemente ligada em uma rede hexagonal. Trata-se de um alótropo do carbono. O grafite pode ser imaginado como várias camadas de Grafeno empilhadas uma sobre as outras. De fato, as camadas singulares de Grafeno, enquanto grafite, são mantidas juntas pelas Forças de van der Waals, que podem ser separadas a partir do grafite.

A relevância do grafeno pode ser facilmente argumentada. Efetivamente, é o composto mais forte descoberto (ordem de centenas em relação ao aço), o melhor condutor térmico à temperatura ambiente, é ainda o composto de menor espessura conhecido, bem como o mais leve. Além disso, é também o melhor condutor elétrico. Portanto, trata-se de um material extremamente notável.

METODOLOGIA

A metodologia adotada consiste na aplicação do método analítico, que de modo simplificado consiste na elaboração de hipóteses, na modelagem matemática e na experimentação. Inicialmente modelaremos as Fases Geométricas e obteremos a fase para um defeito do tipo deslocação. Em seguida, partindo de um modelo para o Grafeno, será desenvolvido um método de geração de uma deslocação.

ANÁLISE

A fim de estudarmos a presença das Fases Geométricas de Berry em meios contendo Deslocações, primeiramente, deve-se levar em consideração o formalismo que será utilizado. Este será a Teoria Geométrica desenvolvida por (Katanaev & Volovich, 1992), na qual os defeitos são interpretados como uma analogia da gravitação tridimensional. Com efeito, consideremos métrica que descreve um o espaço contendo uma deslocação parafuso, escrita em termos das coordenadas cilíndricas:

$$ds^2 = g_{ij}\, dx_i dx_j = (dz + \beta d\varphi)^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 \qquad (2)$$

A fase de Berry será calculada da seguinte maneira: consideramos uma partícula dentro de uma caixa com paredes totalmente reflexivas, ou seja, a partícula não consegue escapar. Com efeito, a partícula será descrita por um pacote de onda que é uma combinação linear de diferentes autofunções do Hamiltoniano. O vetor que localiza a caixa em relação ao defeito será chamado de **R**. Este vetor é orientado da origem do sistema de coordenada (localizado no defeito) ao centro da caixa. Na ausência de defeitos a função de onda correspondente ao modo n é dada por:

$$\psi_n(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{x}) \qquad (3)$$

Em que **x** representa a coordenada da partícula de centro em **R**.

Considere agora que a caixa seja transportada ao redor de um circuito C contornando o defeito. Devido à degenerescência dos autovalores de energia, para calcular fase geométrica de Berry, é necessário usar a versão não-Abeliana da conexão correspondente, conforme tratamento feito por (FURTADO; BEZERRA; MORAES, 2000), dado por:

$$A_n^{ij} = \langle \psi_n^t(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{x}) | \nabla_n \psi_n^t(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{x}) \rangle \qquad (4)$$

Em que i e j garantem os valores possíveis de degenerescência.

O produto interno da eq. 4 pode ser obtido usando o fator de fase de Dirac,

$$\langle \psi_n^t(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})|\nabla_n \psi_n^t(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})\rangle =$$

$$i\int_C dS\psi_n^{I*}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})\left[k_n\beta\psi_n^j(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})+\nabla_R\psi_n^j(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})\right]$$

Calculando-se a integral, tem o resultado:

$$\langle \psi_n^t(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})|\nabla_n \psi_n^t(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{x})\rangle = ik_n\beta\delta_{ij} \tag{5}$$

A Fase Geométrica de Berry pode ser obtida a partir da eq. 5, sendo

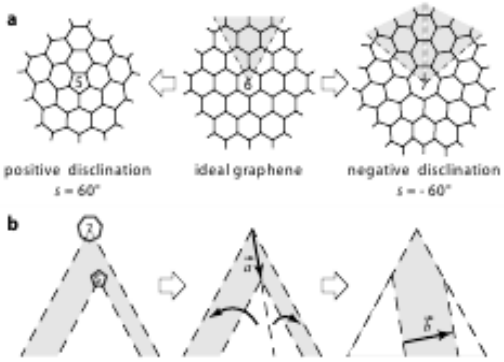
$$\gamma_n(C) = 2\pi\beta k_n \tag{6}$$

Este resultado mostra a presença da fase de Berry em um meio contendo uma deslocação mediante o formalismo Geométrico.

Por fim, o último objetivo do nosso trabalho é estudar os Defeitos Topológicos no Grafeno. De fato, a presença de Defeitos no Grafeno ainda não foi bem compreendida, embora existam muitas observações experimentais (DUTREIX; GOZÁLEZ-HERRERO, BRIHUEGA, 2019). Todavia, Yazyev e colaboradores (YAZYEV, LOUI, 2010) contribuíram nessa compreensão desenvolvendo uma abordagem geral para tratar deslocações no composto, bem como quais as modificações que tais defeitos produzem em suas características elétricas e termodinâmicas.

Para isso, partindo de uma estrutura 2D de Grafeno e de desclinações iniciais, mediante um rearranjo das posições atômicos, cria-se uma deslocação. Como regra para criação dessas estruturas, deve-se assumir que o núcleo de deslocação está livre do excesso ou da insuficiência de carbonos. Objetiva-se com isso, minimizar a energia do núcleo de deslocação, bem como a energia total de formação da deslocação. Além disso, deve-se considerar a deslocação como a conjunção de duas desclinações, uma positiva e outra negativa, ou seja, a remoção e a adição de átomos da estrutura. Como ilustrado na fig.1 a) s= 60° desclinação no Grafeno contém um anel de cinco (sete) membros no seu núcleo enquanto a original coordenação tripla de todos os átomos de carbono são preservados. Em b) está esquematizado a equivalência de um par de desclinações complementares para uma deslocação. Além disso, observa-se que na grade do Grafeno a distância entre duas desclinações, $|\vec{a}|$, está relacionada ao vetor de Burgers resultante $\vec{b}$ pela simples relação, $|\vec{a}| = |\vec{b}|$.

Figura 1: Formação de uma deslocação em uma rede de Grafeno a partir de duas desclinações.



Fonte: (Yazyev, Loui, 2010).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O trabalho buscava compreender o surgimento das Fases Geométricas de Berry. Nesse sentido, verificamos o surgimento das Fases Geométricas partindo de um processo adiabático e o obtendo a equação que a descreve. Em seguida, ampliamos nosso estudo e obtivemos a Fase de Berry como desejávamos. Foi mostrada sua aparição em Defeitos Topológicos, tratando um defeito do tipo deslocação. Além disso, esse resultado robustece a Teoria Geométrica de Defeitos, uma vez que os resultados foram obtidos mediante esse formalismo.

Finalmente, estudamos o Grafeno, a fim de investigar a presença de Defeitos Topológicos nesse material com grande potencial tecnológico. De fato, foi mostrado um método geral para geração de deslocações, partindo de duas desclinações.

REFERÊNCIAS

DUTREIX, C. et al. Measuring the Berry phase of graphene from wavefront dislocations in Friedel oscillations. **Nature**, v. 574, n. 7777, p. 219-222, 2019.

FURTADO, C.; BEZERRA, V. B.; MORAES, F. Berry's quantum phase in media with dislocations. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 52, n. 1, p. 1, 2000.

GRIFFITHS, David J. **Introduction to quantum mechanics**. Pearson International Edition (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 2005), 468 p., 1960.

RIBEIRO, C. A. de L., Dinâmica de partículas na presença de defeitos topológicos. Tese de Doutorado, UFPE, Recife-PE, 2001.

KATANAEV, M. O.; VOLOVICH, I. V. *Theory of defects in solids and three-dimensional gravity.* **Annals of Physics**, v. 216, n. 1, p. 1-28, 1992.

YAZYEV, Oleg V.; LOUIE, Steven G. *Topological defects in graphene: Dislocations and grain boundaries.* **Physical Review B**, v. 81, n. 19, p. 195420, 2010.