



UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA  
CAMPUS I - CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM LICENCIATURA EM FÍSICA

ANTÔNIO NARCISO DE LIMA NETO

UM ESTUDO INTRODUTÓRIO SOBRE DEFEITOS TOPOLÓGICOS E  
FASES GEOMÉTRICAS NO GRAFENO

CAMPINA GRANDE

2024

**ANTÔNIO NARCISO DE LIMA NETO**

**UM ESTUDO INTRODUTÓRIO SOBRE DEFEITOS TOPOLÓGICOS E  
FASES GEOMÉTRICAS NO GRAFENO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Departamento de Física da Universidade  
Estadual da Paraíba, como requisito parcial  
à obtenção do título de Licenciado em Física

**Área de concentração:** Física

**Orientador:** Dr. Everton Cavalcante

**CAMPINA GRANDE**

**2024**

É expressamente proibida a comercialização deste documento, tanto em versão impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que, na reprodução, figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

L732e Lima Neto, Antonio Narciso de.  
Um estudo introdutório sobre defeitos topológicos e fases geométricas no grafeno [manuscrito] / Antonio Narciso de Lima Neto. - 2024.  
49 f. : il. color.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2024.

"Orientação : Prof. Dr. Everton Cavalcante, Departamento de Física - CCT".

1. Defeitos topológicos. 2. Holonomias quânticas. 3. Folhas de grafeno. I. Título

21. ed. CDD 530.41

ANTONIO NARCISO DE LIMA NETO

UM ESTUDO INTRODUTÓRIO SOBRE DEFEITOS TOPOLÓGICOS E FASES  
GEOMÉTRICAS NO GRAFENO

Monografia apresentado à  
Coordenação do Curso de Física da  
Universidade Estadual da Paraíba,  
como requisito parcial à obtenção do  
título de Licenciado em Física

Aprovada em: 07/11/2024.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado eletronicamente por:

- **Everton Cavalcante** (\*\*\*.699.765-\*\*), em **26/11/2024 08:21:42** com chave **9d00b78eabe811ef894406adb0a3afce**.
- **Bugley de Farias Ramos Junior** (\*\*\*.295.564-\*\*), em **26/11/2024 10:52:44** com chave **b61a400eabfd11ef9f9e06adb0a3afce**.
- **Alex da Silva** (\*\*\*.295.004-\*\*), em **26/11/2024 11:26:29** com chave **6d62298aac0211efb8a81a1c3150b54b**.

Documento emitido pelo SUAP. Para comprovar sua autenticidade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse [https://suap.uepb.edu.br/comum/autenticar\\_documento/](https://suap.uepb.edu.br/comum/autenticar_documento/) e informe os dados a seguir.

**Tipo de Documento:** Folha de Aprovação do Projeto Final

**Data da Emissão:** 19/03/2025

**Código de Autenticação:** 921393



Dedico esse trabalho à Avani Lima do Nascimento (*in memoriam*), minha tia.

## AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico–Brasil. Por meio do programa de iniciação científica PIBIC/CNPq-UEPB. Os agradecimentos da realização deste trabalho vão para:

Aos meus pais, Maria Martinha e Francisco Domiciano (Cosmo), por todo apoio, conselhos e amor. Agradeço a minha falecida tia Avani, à qual me apoiou durante o início do curso de Física, onde sou e sempre serei grato a ela. Agradeço também aos familiares e amigos, em especial a Maria Narciso, meu irmão João Narciso e sua esposa Lorena, Renata Domiciano e seu marido John Kennedy, José Carlos (vulgo JC) e Maria Domiciano.

Aos meus colegas de curso que, durante esses anos, proporcionaram momentos de alegria, entre eles Ana Beatriz (que é mais que amiga, é prima), Viviane Chagas, Welton Douglas, Cris e seu grande marido Igor, Hemillys, Junio Blacksmith, Júlia e Lindalva, que me proporcionaram aventuras e risadas que lembrarei sempre.

A todos os professores do Departamento de Física, em especial ao meu orientador, professor Dr. Everton Cavalcante, aos professores da banca Dr. Alex da Silva, pelos conselhos e ensinamentos que levarei para a vida e Dr. Bugley Ramos por todo apoio.

”O universo não foi feito à medida do ser humano, mas tampouco lhe é adverso: é-lhe indiferente.” **Carl Sagan**

## RESUMO

Nesse trabalho, estudamos defeitos topológicos presentes em folhas de grafeno e, especificamente, utilizamos argumentos da mecânica quântica para descrever as holonomias quânticas obtidas para partículas afetadas por esses defeitos, discutindo aspectos do grafeno e as fases geométricas, além de como as aplicabilidades dos defeitos podem ser explicadas. Tais defeitos são descritos aqui utilizando uma geometria diferencial que possibilita a sua descrição e classificação. O uso de fases geométricas é observado em funções de onda, onde há uma mudança de fase na função. Esse fenômeno foi observado por Aharonov e Bohm, que demonstraram que a função de onda de um elétron, ao ser afetada por um potencial vetor, adquire uma fase geométrica. Na física, o uso de fases geométricas pode ser especialmente observado em sistemas como o grafeno, onde esses efeitos, análogos ao efeito Aharonov-Bohm, podem ser notados. Além disso, uma abordagem que utiliza dimensões extras pode proporcionar um grau de liberdade maior para descrever a mudança de fase das funções de onda geradas devido à presença de defeitos topológicos.

**Palavras-chave:** defeitos; fase; grafeno.

## ABSTRACT

In this work, we study topological defects present in graphene sheets and, specifically, we use quantum mechanical arguments to describe the quantum holonomies obtained for particles affected by these defects, discussing aspects of graphene and geometric phases, as well as how the applicability of defects can be explained. Such defects are described here using a differential geometry that allows their description and classification. The use of geometric phases is observed in wave functions, where there is a phase change in the function. This phenomenon was observed by Aharonov and Bohm, who demonstrated that the wave function of an electron, when affected by a vector potential, acquires a geometric phase. In physics, the use of geometric phases can be especially observed in systems such as graphene, where these effects, analogous to the Aharonov-Bohm effect, can be noted. In addition, an approach that uses extra dimensions can provide a greater degree of freedom to describe the phase change of wave functions generated due to the presence of topological defects.

**Palavras-chave:** defects; phase; graphene.

## SUMÁRIO

	Página
<b>1</b> <b>INTRODUÇÃO</b>	<b>9</b>
<b>2</b> <b>DEFEITOS TOPOLOGICOS</b>	<b>11</b>
<b>3</b> <b>FASE GEOMETRICA</b>	<b>18</b>
<b>4</b> <b>MODELANDO DEFEITOS NO GRAFENO</b>	<b>33</b>
<b>5</b> <b>CONCLUSÃO</b>	<b>47</b>
<b>6</b> <b>REFERÊNCIAS</b>	<b>48</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O carbono é um dos principais elementos necessários para a criação da vida na natureza e pode existir de diversas formas, como grafite, diamante, nanotubos e grafeno. A ideia de existir uma estrutura bidimensional era apenas teórica até o início dos anos 2000, quando um grupo de pesquisadores conseguiu isolar a primeira forma bidimensional, o grafeno. Este material possui o formato de uma folha com um átomo de espessura, semelhante à estrutura do grafite, sendo, portanto, um material bidimensional. Cada átomo de carbono está a uma distância aproximada de 1,42 Å dos seus vizinhos, formando uma rede hexagonal com formato semelhante a um favo de mel.

O grafeno e seus derivados apresentam características interessantes, como a baixa dimensionalidade: o fulereno é uma folha de grafeno moldada em formato esférico (0D); os nanotubos são folhas enroladas em formato tubular (1D); e o grafite é composto por várias camadas empilhadas de grafeno (3D). O grafeno (2D) destaca-se por suas propriedades eletrônicas, sendo um excelente condutor de eletricidade, com potencial muito elevado quando comparado aos materiais atualmente utilizados em semicondutores.

Na mecânica quântica, o uso de fases geométricas, como a fase de Berry, ajuda a explicar certas propriedades observadas na rede do grafeno. A fase de Berry é uma característica da função de onda quando afetada por um parâmetro externo, e essa fase é puramente geométrica, dependendo exclusivamente de um parâmetro.

$$\psi = e^{i\gamma(\beta)} e^{\theta_n} \quad (1.1)$$

$$\gamma(\beta) = \int_0^t \left\langle \psi'_n(\beta) \left| \frac{\partial \psi_n(\beta')}{\partial \beta'} \right. \right\rangle d\beta' \quad (1.2)$$

Fases como essa foram amplamente exploradas a partir de 1959 por Aharonov e Bohm, que demonstraram que a função de onda de um elétron adquire um fator de fase geométrico ao passar por uma região influenciada por um potencial vetor de um campo magnético. Esse fenômeno, anteriormente considerado uma ferramenta matemática, passou a ter relevância física ao gerar uma fase geométrica análoga à fase de Berry. No grafeno, essas fases podem ser observadas na presença de defeitos topológicos na rede, o que faz com que os elétrons que trafegam pela rede adquiram fases geométricas em suas funções de onda, similar à generalização das fases de Berry e Aharonov-Bohm.

Esse fenômeno é descrito no grafeno por autores referenciados em (BAKKE; PETROV; FURTADO, 2012), e para o fulereno em (CAVALCANTE; FURTADO, 2021),

utilizando uma abordagem baseada na teoria geométrica dos defeitos de Katanaev e Volovich (KATANAEV; VOLOVICH, 1992), que emprega uma métrica Riemanniana, semelhante à encontrada no estudo da gravidade. Assim, em uma analogia gravitacional, foi proposto o uso de outra teoria para descrever fases geométricas no grafeno e seus derivados, considerando dimensões extras.

Na física, uma das abordagens pioneiras para unir relatividade e eletromagnetismo foi a teoria de Kaluza-Klein, que utilizava dimensões extras em sua descrição. Embora essa teoria tenha sido deixada de lado na física de altas energias, ao ser aplicada na teoria geométrica dos defeitos de Katanaev e Volovich em sólidos, ela pode se mostrar eficaz na descrição de fases geométricas, como as observadas no efeito Aharonov-Bohm.

Neste trabalho, mostramos como, utilizando a teoria geométrica dos defeitos e a teoria de Kaluza-Klein com dimensões extras, é possível obter fases geométricas para partículas massivas na rede bidimensional do grafeno e de seus derivados.

## 2 DEFEITOS TOPOLOGICOS

Popularmente, cristais são muitas vezes associados a objetos de grande valor, como diamantes e outras joias. No entanto, ao estudarmos sólidos na física, percebemos que a definição de cristal abrange muitos outros materiais, que, embora não pareçam à primeira vista, também se enquadram nessa categoria. O verdadeiro teste de cristalinidade não está na aparência do material, mas sim em sua estrutura microscópica, onde íons se distribuem em arranjos periódicos que se repetem em uma rede. Esses arranjos periódicos revelam muito sobre as propriedades do material.

Em um cristal, é comum haver uma quantidade significativa de defeitos, os quais desempenham um papel crucial nas propriedades do material. Quando ocorre uma mudança na estrutura do cristal, conhecida como quebra de simetria, devido à presença desses defeitos, as propriedades do material podem ser alteradas. Existem diversas abordagens para descrever defeitos em cristais, sendo uma delas o uso da geometria diferencial, similar ao que é aplicado na gravitação tridimensional. Esse formalismo matemático permite descrever e classificar defeitos de maneira mais precisa, e será utilizado ao longo deste trabalho.

Para ilustrar como a teoria desenvolvida por Katanaev e Volovich pode ser aplicada, começaremos por mostrar como um cristal é descrito matematicamente:

$$\vec{X}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i \quad (2.1)$$

essa é a descrição de um cristal ideal, onde três vetores  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$ , chamados de vetores de translação, formam uma combinação linear que define as direções e os comprimentos das unidades que se repetem na rede cristalina.

Sólidos ideais são apenas um conceito teórico para simplificar a descrição na física. Na natureza, porém, qualquer amostra de material contém uma abundância de deformações, que desempenham um papel crucial nas propriedades do cristal. Isso nos leva a uma importante motivação para o estudo dos defeitos topológicos: a possibilidade de manipular essas deformações para aprimorar características de materiais cristalinos de maneiras que antes não eram possíveis.

Para descrever defeitos em cristais, Katanaev e Volovich utilizaram a geometria di-

ferencial de Riemann-Cartan, tratando o cristal como um meio elástico e contínuo. Nesse contexto, a métrica torna-se não trivial na presença de defeitos, o que é particularmente interessante, pois além da descrição geométrica oferece também a possibilidade de entender outros tipos de defeitos que antes não podiam ser descritos adequadamente. É com essa abordagem que a equação (2.1) ganha significado, já que ela utiliza uma métrica euclidiana, livre de alterações na rede cristalina por se referir a um cristal ideal (KATANAIEV, 2005; BAKKE FILHO, 2009). No entanto, quando forças externas são aplicadas, surgem deformações que quebram a simetria da rede, deslocando as posições dos átomos e resultando em defeitos. Essa modificação que é  $X_n \rightarrow X'_n$  na estrutura do cristal pode ser expressa da seguinte forma:

$$X_n \rightarrow X'_n = X_n + U_n(X), \quad (2.2)$$

E como um meio contínuo agora, ao fazer o limite  $a \rightarrow 0$ , onde  $a$  é a distância interatômica entre os átomos é possível definir o campo de deslocamento,

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

Mostrando que a consequência dos deslocamentos é que causam os defeitos. Com a última expressão podemos agora considerar a distância e comprimento entre dois pontos como,

$$dx'_i = x_i + \partial_j u_i dx_j. \quad (2.4)$$

Sendo o comprimento dado por  $dl = \sqrt{dx_i^2}$ . Ou ainda:

$$dl' = \sqrt{dl^2 + 2\epsilon_{ij} dx_i dx_j}. \quad (2.5)$$

O tensor  $\epsilon_{ij}$  é chamado de tensor de deformação que é

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i \partial_i u_l \partial_j u_l). \quad (2.6)$$

Contudo, se considerarmos  $\partial_i u_i \ll 1$ , o tensor assume uma nova forma como:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (2.7)$$

Agora se tem posse de ferramentas que possibilitam a definição de energia elástica dada por  $dl' - dl$  onde se faz uma aproximação para termos de ordem mais baixa.

$$e(X) = \frac{1}{2} c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}. \quad (2.8)$$

Em que  $c_{ijkl}$  é o tensor de elasticidade, onde é simétrico com permutações,  $i \leftrightarrow j$ ,  $k \leftrightarrow l$  e  $ij \leftrightarrow kl$ . Para um meio isotrópico o tensor de elasticidade é

$$c_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (2.9)$$

Em que  $\mu$  e  $\lambda$  são chamados de constantes Shear módulos e constante de Lamé.

Se por algum motivo haja uma alteração no tensor de deformação  $\epsilon_{ij}$  pela adição de  $\delta\epsilon_{ik}$  resulta na densidade de energia elástica como sendo (BAKKE FILHO, 2009):

$$\delta e = c_{ijkl} \epsilon_{kl} \delta \epsilon_{ik}. \quad (2.10)$$

E então é definido o tensor de tensão como sendo,

$$\sigma_{ij} = \frac{\delta e}{\delta \epsilon_{ij}} = c_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (2.11)$$

E quando substitui a equação (2.9) e com a última equação resulta em

$$\sigma_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij}\epsilon_{kk}. \quad (2.12)$$

Para o caso de uma fonte externa aplicar força no sólido cristalino, o trabalho que essa força realiza é dado pelo elemento de volume,

$$\omega(x) = -f_i(X)u_i(X). \quad (2.13)$$

Portanto, ao ter a energia elástica e trabalho, a força que atua no sistema é a soma dessas duas em um volume.

$$F_T = \int [e(X) + \omega(X)] d^3x. \quad (2.14)$$

Ao minimizar a energia total em relação ao estado  $\omega u_i(X)$  obtém-se o estado de equilíbrio para o caso de distorções na rede cristalina, algo que fica na forma de

$$\int [\partial_i(\delta u_i)\sigma_{ij} - f_i\delta u_j] d^3x = 0 \quad (2.15)$$

$$\int [\partial_i(\delta u_j\sigma_{ij}) - \delta u_j\partial_j\sigma_{ij}] d^3x - \int f_i\delta u_j dx^3 = 0. \quad (2.16)$$

Ao aplicar-se o teorema de Gauss resulta na equação no seguinte formato,

$$\int \sigma_{ij}\delta u_i dS_j - \int (\partial_i\sigma_{ij} + f_i)\delta u_j dx^3 = 0. \quad (2.17)$$

Que faz com que o primeiro termo seja uma integral de superfície e tendo em vista que ao considerar a força externa aplicada no cristal é em uma região finita faz com que o termo  $\delta u_i \rightarrow 0$  no infinito e com esse artifício a integral é descartada e o que se tem é uma equação de Euler-Lagrange para a elasticidade linear.

$$\partial_i\sigma_{ij}(X) + f_i(X) = 0. \quad (2.18)$$

Mostrando então que as componentes do tensor de tensão,  $\sigma_{i1}$ ,  $\sigma_{i2}$ ,  $\sigma_{i3}$  agora tem um sentido físico que são componentes da força por unidade de área que atuam sobre  $dS_i$ . Agora as equações (2.12) e (2.18) formam as bases para a lei de Hook na qual relaciona o tensor de tensão com o de deformação, já a equação (2.16) corresponde a lei de Newton. E diante dessas informações, a ligação com a teoria da elasticidade com a geometria de Riemann-Cartan vem ao consideram-se transformações infinitesimais que levam de um ponto  $X^{\mu'}$  para  $X^{\mu}$  no espaço-tempo (BAKKE FILHO, 2009; KATANAEV; VOLOVICH, 1992; KATANAEV, 2005).

$$X^{\mu'} = X^{\mu} + \xi^{\mu}(X). \quad (2.19)$$

É interessante observar que o termo  $\xi^{\mu}(X)$  é igual ao de deslocamento  $u_i(x)$  mas com sinal inverso. Considerando então  $x' = y$  e  $u_i(x) = u_i(y(x))$  temos informações suficientes para escrever o tensor métrico como:

$$g_{ij}(x) = \frac{\partial y^k}{\partial x^i} \frac{\partial y^l}{\partial x^j} \delta_{kl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\epsilon_{ij}. \quad (2.20)$$

Com a aproximação linear,  $\epsilon_{ij}(x) = \epsilon_{ij}(y)$  e  $\frac{\partial u_j}{\partial x^i} = \frac{\partial u_j}{\partial y^i}$ . A métrica da geometria

Riemanniana define exclusivamente a conexão de Levi-Civita com o termos de Christoffel do formato

$$\Gamma_{ijk} = \frac{1}{2}(\partial_i g_{jk} + \partial_j g_{ik} - \partial_k g_{ij}). \quad (2.21)$$

E a partir disso defini-se o tensor de curvatura como sendo,

$$R^l_{ijk} = \partial_i \Gamma^l_{jk} - \Gamma^m_{ik} \Gamma^l_{jm} - (i \leftrightarrow j). \quad (2.22)$$

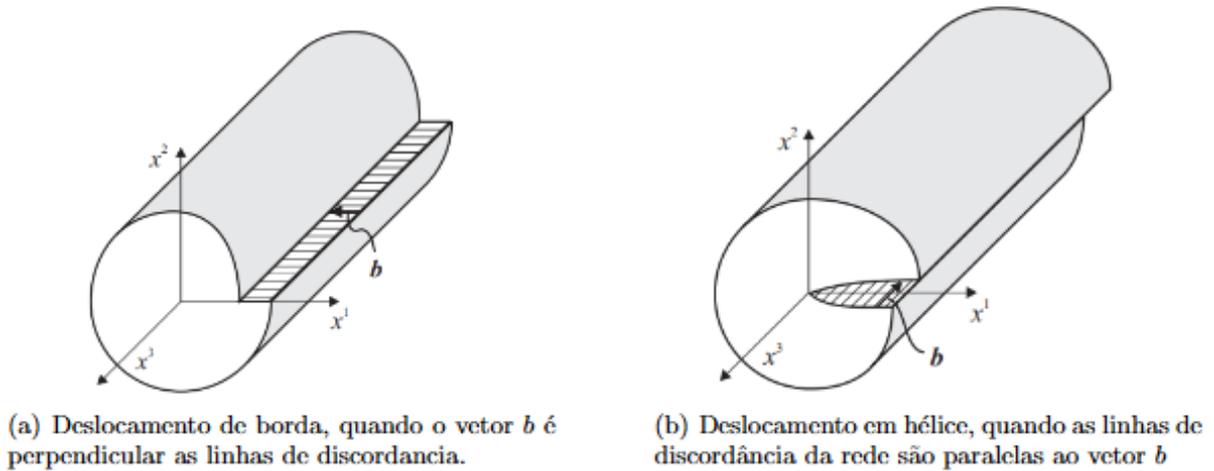
Tanto o tensor de curvatura quanto o de tensão são iguais a zero, pois a curvatura do espaço euclidiano é zero. A equação da métrica (2.20) tem o significado físico de que, ao se ter um sistema de coordenadas cartesianas bem definido para um estado da rede cristalina livre de deformações, uma mudança nesse estado, por meio de uma quebra de simetria da rede cristalina, faz com que o sistema passe a ser descrito por uma métrica não trivial para suas coordenadas. No caso de perturbações elásticas no cristal se propagando em um eixo,  $x^k(t)$ , as deformações ao longo desse eixo são dadas por equações do tipo (KATANAEV, 2005),

$$\ddot{x}^k = -\Gamma^k_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j. \quad (2.23)$$

Em que os pontos estão relacionados a algum parâmetro  $t$ . As perturbações agora serão mais lineares, pois os símbolos de Christoffel não são triviais, ou seja,  $\Gamma^k_{ij} \neq 0$ . Portanto, na descrição de defeitos, observa-se que é possível descrevê-los em cristais a partir de uma abordagem de geometria diferencial, utilizando um sistema de coordenadas com uma métrica trivial, ou seja, com variáveis bem definidas. Para o caso com defeitos, esses serão descritos por uma métrica não trivial, que varia de um ponto a outro.

A partir de toda a teoria geométrica para defeitos desenvolvida, Katanaev e Volovich puderam descrever e classificar defeitos topológicos usando um processo chamado de Volterra, ou 'corta e cola', que consiste em remover um segmento da rede e colá-lo em outra parte da estrutura. Existem tipos de defeitos relacionados à translação chamados de **Deslocações**, os quais são defeitos lineares. Ao cortar a rede em um semiplano  $x^0 = 0$ ,  $x^1 > 0$ , e movendo-se ao longo da superfície de corte pelo chamado vetor de Burgers  $b$  na direção de  $x^3$  surge o que é conhecido como deslocamento de borda. Após o ajuste e a rede atingir o equilíbrio, esses defeitos podem ser classificados em dois tipos: *borda* ou *hélice*. Este último é definido quando o vetor  $b$  é paralelo às linhas da discordância da rede (KATANAEV; VOLOVICH, 1992); (KATANAEV, 2005).

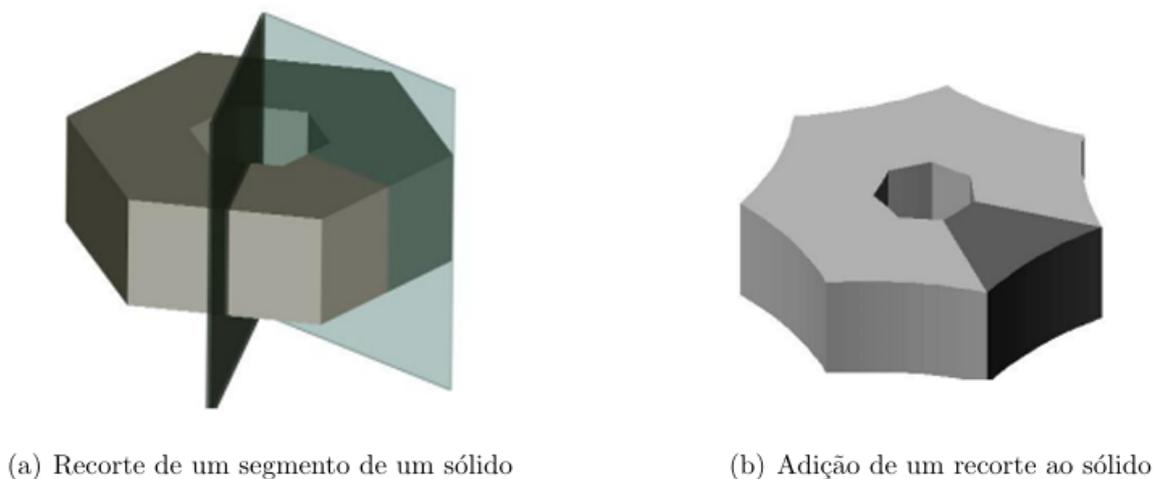
Figura 1 – Deslocamento em hélice, quando as linhas de discordância da rede são paralelas ao vetor  $b$



Fonte: M. O. KAtanaev. (2005).

Já os defeitos do tipo **Disclinações** estão relacionados à simetria de rotação da rede cristalina e podem ser classificados em dois tipos: as disclinações positivas, que ocorrem quando há um ângulo de déficit — isto é, ao se cortar uma parte do material, forma-se um defeito onde falta um pedaço do sólido —, e as disclinações negativas, que surgem quando se cola ou adiciona outro setor ao material, criando um ângulo de acréscimo ao integrar o pedaço externo (BAKKE FILHO, 2009; KATANAEV; VOLOVICH, 1992).

Figura 2 – Deslocamento em hélice, quando as linhas de discordância da rede são paralelas ao vetor  $b$



Fonte: Knut Bakke Filho. (2009).

A partir da abordagem geométrica, sabemos que esta é uma ferramenta eficaz para a descrição de defeitos, o que nos leva às consequências dos defeitos em cristais, como o surgimento de fenômenos quânticos interessantes, como as holonomias. Com uma métrica baseada na teoria dos defeitos, é possível descrever fenômenos como fases geométricas quânticas, assim como análogos dos efeitos Aharonov-Bohm e Aharonov-Anandan, os quais serão discutidos no capítulo seguinte deste trabalho.

### 3 FASE GEOMETRICA

Quando partículas quânticas, como um elétron, são transportadas adiabaticamente, ou seja, quando há uma evolução lenta do sistema, de modo que ele dependa apenas do caminho percorrido no espaço de parâmetros, e não do tempo ou das energias, ocorrem fenômenos interessantes. Na mecânica quântica, um exemplo clássico desse comportamento foi demonstrado por Michael Berry em 1984 (BERRY, 1984; NAKAHARA, 2018). Ele mostrou que um sistema que evolui ao longo do tempo adquire uma mudança de fase adicional à que já existia na função de onda. Esse termo a mais na função de onda é chamada de fase geométrica, sendo independente tanto do tempo quanto da energia do sistema.

Para começar, apresentaremos a demonstração matemática da fase de Berry, onde será possível observar a fase geométrica na função de onda. Todavia, é necessário partir de uma aproximação adiabática, a qual é descrita por um teorema que afirma que, supondo que o Hamiltoniano mude gradualmente de uma forma inicial  $H_i$  para uma forma final  $H_f$ , esse teorema garante que, se a partícula estiver inicialmente no  $n$ -ésimo autoestado de  $H_i$ , ela será conduzida ao  $n$ -ésimo autoestado de  $H_f$ . Considerando que ocorra sob a suposição de que o espectro do Hamiltoniano seja discreto e não degenerado ao longo da transição de  $H_i$  para  $H_f$  (GRIFFITHS, 2005; BOHM et al., 2013). Portanto, dada a equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$H(t)\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t), \quad (3.1)$$

um  $H$  que depende explicitamente do tempo, mas para cada instante do sistema, se tem um conjunto de funções de onda e de autoenergias. As energias  $E$  formam uma base ortonormal:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (3.2)$$

Onde, pode-se escrever qualquer função do tempo como combinação linear de  $c_n \psi_n(t) e^{i\theta(t)}$

$$\psi(t) = \sum_n c_n \psi_n(t) e^{i\theta(t)}. \quad (3.3)$$

Onde,

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad (3.4)$$

$$\theta_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt. \quad (3.5)$$

Substituindo na equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(t) = H(t) \psi_n(t) \quad (3.6)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_n c_n(t) \psi_n(t) e^{i\theta(t)} \right] = H(t) \psi_n(t) \quad (3.7)$$

$$i\hbar \sum_n \left[ \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} + c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} + C_n \psi_n (i) \left(-\frac{1}{\hbar}\right) E_n e^{i\theta_n} \right] = H(t) \psi_n(t) \quad (3.8)$$

$$i\hbar \sum_n \left[ \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} + c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} + C_n \psi_n (i) \left(-\frac{1}{\hbar}\right) E_n e^{i\theta_n} \right] = \sum_n c_n e^{i\theta_n} H(t) \psi_n(t) \quad (3.9)$$

O lado direito da equação acima  $H(t)\psi_n(t)$  pode ser igualado a  $E_n(t)\psi_n(t)$ . Quando aplicamos o  $(i\hbar)$  da equação e distribuir no colchete temos que  $\frac{\hbar}{\hbar} = 1$  e a multiplicação  $i \cdot i$  irá cancelar o sinal de subtração. Portanto, a equação pode se resultar em:

$$\sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} + \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} + \sum_n \psi_n c_n E_n e^{i\theta_n} = \sum_n c_n e^{i\theta_n} E_n(t) \psi_n(t) \quad (3.10)$$

Da equação acima podemos observar que o terceiro termo do lado esquerdo com o termo do lado direito é possível cancelar pois  $H(t)\psi(t) = E_n(t)\psi_n(t)$ . Portanto, resulta na equação:

$$\sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} + \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} = 0 \quad (3.11)$$

$$\sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n}. \quad (3.12)$$

Agora faremos um *bra-ket*, onde o *bra* será  $\langle \psi_n |$ . multiplicando a equação (3.12) obtemos:

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

Agora precisa-se descobrir quem é  $\langle \psi_n | \dot{\psi}_n \rangle$ . E para isso se utiliza a equação de Schrödinger onde deriva-se primeiro e logo após multiplicar pelo "bra"  $\langle \psi_m |$  e em seguida substituir na equação (3.13)

$$H(t)\psi(t) = E_n(t)\psi_n(t) \quad (3.14)$$

$$\dot{H}\psi_n(t) + H\dot{\psi}_n = \dot{E}_n\psi_n + E_n\dot{\psi}_n \quad (3.15)$$

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

Como o  $H$  é hermitiano ao fazer o resultado do,  $\langle \psi_m | H | \dot{\psi}_n \rangle$  a equação (3.16) resulta no próprio  $E_m \psi_m$ . Se  $m \neq n$  devido à ortogonalidade deve então ser zero, portanto:

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0 \quad (3.17)$$

$$E_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle - E_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle = - \langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle \quad (3.18)$$

$$\langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle = \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_m \rangle}{E_n - E_m}. \quad (3.19)$$

A equação (3.19) mostra uma derivada do Hamiltoniano dividido pela subtração entre as energias,  $\dot{H}$  é muito menor que a diferença de quaisquer níveis de energia no sistema. Agora substituindo na equação (3.13) resulta em:

$$c_m e^{i\theta_m} = - \sum_n c_n e^{i\theta_n} \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle \quad (3.20)$$

$$e^{i\theta_n} \dot{c}_m = - \sum_n c_n e^{i\theta_n} \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle \quad (3.21)$$

$$e^{i\theta_n} \dot{c}_m = - \sum_n c_n e^{[\theta_n - \theta_m]} \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle \quad (3.22)$$

$$e^{i\theta_n} \dot{c}_m = - \sum_n c_n e^{[\theta_n - \theta_m]} \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \quad (3.23)$$

Quando  $n = m$ ,  $e^{[\theta_n - \theta_m]}$  não terá mais importância. E obteremos assim:

$$\dot{c}_m = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle - \sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} c_n. \quad (3.24)$$

A aproximação adiabática significa que, embora o Hamiltoniano varie no tempo, sua derivada é tão pequena que tende a zero. Isso se reflete no termo  $\sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} c_n$ , onde  $\dot{H} \rightarrow 0$ . Dessa forma,  $\dot{c}_m$  depende apenas de  $c_m$  e não dos outros coeficientes  $c_n$ .

Isso implica que, se o sistema começa no  $m$ -ésimo estado e todos os outros  $c_n$  (com  $n \neq m$ ) forem zero, ele permanecerá no  $m$ -ésimo estado indefinidamente, já que não haverá contribuições dos outros estados  $n \neq m$ , desde que o termo seja nulo.

Portanto, na aproximação adiabática, mesmo que o Hamiltoniano varie no tempo, a partícula no sistema permanece no  $m$ -ésimo estado. Isso ocorre desde que o termo  $\sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} c_n$  seja zero. E o que restará da equação é apenas o primeiro termo onde  $\dot{c}_m$  depende apenas dele mesmo.

$$\dot{c}_m = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle \quad (3.25)$$

$$c_m = c_m(0) e^{i\gamma(t)}. \quad (3.26)$$

Quando  $t = 0$  e  $\gamma(t) = 0$ , portanto  $i\gamma(0)$  será:

$$c_m = c_m(0) e^0 \quad (3.27)$$

$$c_m = c_m \quad (3.28)$$

A equação acima está regulada para a condição do problema. Definindo  $\gamma(t)$  :

$$\gamma(t) = i \int_0^t \langle \psi'_m(t') | \frac{\partial \psi_m(t')}{\partial t'} dt' \quad (3.29)$$

A equação [3.29](#) é a fase geométrica a qual estávamos interessados. O que resulta na função de onda do tipo:

$$\psi(t) = \sum n c_n(0) e^{i\gamma(t)} e^{i\theta_n} \psi(t) \quad (3.30)$$

Que agora, além do termo da fase dinâmica  $e^{i\theta_n}$  que é proveniente da solução da equação de Schrödinger agora passa a adquirir um novo termo a qual é chamado de fase de Berry  $\gamma(t)$ .

A fase de Berry é um resultado importante a qual pode ser mostrado em efeitos gerados por elementos da física como campos magnéticos e potenciais vetores. E nos leva a pergunta que pode mostrar resultados interessantes para utilizarmos nos nossos estudos que é, como fica uma função de onda que evolui no tempo com o Hamiltoniano dependente do tempo  $H(t)$ , mas que varie vagarosamente, ou seja, de forma adiabática?. Agora temos informações sobre a fase dinâmica e geométrica da função de onda e partindo dela (GRIFFITHS, 2005; BERRY, 1984; BERNEVIG, 2013) :

$$\psi(t) = \sum n c_n(0) e^{i\theta_n} \psi_n e^{i\gamma(t)}. \quad (3.31)$$

Onde  $\theta_n$  e  $\gamma_n(t)$  são:

$$\theta_n = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad (3.32)$$

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial t'} \rangle dt' \quad (3.33)$$

De forma que se deriva  $\gamma_n(t)$  encontrando uma fase que tal que:

$$C_n(t) = c_n(0) e^{i\gamma(t)}, \quad (3.34)$$

e ainda podendo reescrever como

$$\dot{c}_n(t) = -c_n \langle \psi_n | \dot{\psi}_n \rangle \quad (3.35)$$

As equações [\(3.34\)](#) e [\(3.35\)](#) constituem as regras para transições adiabáticas na mecânica quântica. A fase geométrica, ou fase de Berry, apresenta algumas propriedades, entre elas, a aparição de algo análogo a um potencial vetorial. Para deduzir isso, começaremos explicando por que o termo  $\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial t'} \rangle dt'$  é complexo. A ideia é que:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = c^{\pm e} \quad (3.36)$$

Já que o  $\psi_n \cdot \psi_n = \text{constante}$  a sua derivada resultará em zero.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 0 \quad (3.37)$$

Implicando que:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi_n | \psi_n \right\rangle = - \left\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \right\rangle \quad (3.38)$$

O termo à esquerda da equação (3.38) é o complexo conjugado do termo à direita da mesma. Portanto:

$$\left[ \left\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \right\rangle \right]^* = - \left\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \right\rangle \quad (3.39)$$

O termo à esquerda da equação acima é, portanto, igual ao seu negativo. O conjugado do termo à esquerda da equação (3.38) é igual ao negativo do termo à direita da equação (3.39), pois esse termo é puramente imaginário. Com isso, demonstra-se que o "bra-ket" na definição de  $\gamma_n$  é puramente imaginário e, mesmo que os  $i$ 's se cancelem, ainda haverá uma fase.

Ao introduzir uma variação temporal no Hamiltoniano, não é exatamente o Hamiltoniano  $H$  ou a função de onda que variam diretamente com o tempo. Na verdade, é algum parâmetro do Hamiltoniano que está sendo alterado, como um campo magnético ou a velocidade que varia com o tempo. Portanto, o tempo não é a variável que modifica diretamente  $H$ , mas sim algo que altera o Hamiltoniano de forma indireta. Dessa forma, obtém-se agora um conjunto de coordenadas.

$$R(t), \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial R} \frac{dR}{dt} \quad (3.40)$$

A fase de Berry irá mudar para os parâmetros que estão sendo definidos.

$$\gamma_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \left\langle \psi_n(R) | \frac{\partial}{\partial R} \psi_n(R) \right\rangle \frac{dR}{dt} dt \quad (3.41)$$

$$\gamma_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle \cdot d\vec{R}. \quad (3.42)$$

A equação (3.42) é o formato da fase de Berry. Já a equação (3.40) pode ser generalizada para:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial R_1} \frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial R_2} \frac{dR_2}{dt} + \dots + \frac{\partial\psi}{\partial R_n} \frac{dR_n}{dt} = (\nabla_R \psi_n) \cdot \frac{d\vec{R}}{dt} \quad (3.43)$$

$$\gamma_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\vec{R} \quad (3.44)$$

Quando se realiza uma integral de um ponto a outro sobre o vetor  $\vec{R}$ , é possível chamar o termo resultante da integral de uma espécie de potencial vetor  $\vec{A}$ . Se esse círculo passar de  $R_{inicial}$  para  $R_{final}$ , mas o  $R_{final} = R_{inicial}$ , poderia ter isso como um caminho fechado. e reescrevendo a equação (3.44)

$$\gamma_n = i \oint_C \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle d\vec{R} \quad (3.45)$$

Onde  $i \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = \vec{A}$  e a partir do teorema de Stokes pode-se fazer uma mudança na integral da equação acima para:

$$\gamma_n = \int_S \vec{\nabla}_R \times \vec{A} \cdot d\vec{a}. \quad (3.46)$$

O termo na equação  $\vec{\nabla}_R \times \vec{A} = \vec{B}$ . O campo magnético não existe, mas parece de forma que aqui é mostrado de forma matemática. Portanto, agora como as definições ou regras temos que:

- $\vec{A}$  é o potencial vetor que é de conexão de Berry;
- $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  é chamado de curvatura de Berry.

Como é que o campo magnético que vem da fase de Berry (essa analogia do campo magnético) trás informação sobre o sistema? A resposta para isso pode ser dada como:

$$\vec{A} = i \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \quad (3.47)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (3.48)$$

Substituindo  $\vec{A}$  em  $\vec{B}$  obtemos:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times i \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \quad (3.49)$$

$$\vec{B} = i \langle \vec{\nabla}_R \psi_n | x | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle. \quad (3.50)$$

Agora deve-se encontrar o gradiente de  $\psi_n$ .

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad (3.51)$$

O gradiente da expressão inteira, terá um termo que vai ser possível isolar o termo gradiente do  $\psi_n$ ,  $\vec{\nabla}_R\psi_n$ .

$$(\vec{\nabla}H)|\psi_n\rangle + H|\vec{\nabla}\psi_n\rangle = \vec{\nabla}_R E_n|\psi_n\rangle + E_n|\vec{\nabla}\psi_n\rangle \quad (3.52)$$

Aplicando um bra  $|\psi_m\rangle$

$$\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R H|\psi_n\rangle + E_m\langle\psi_n|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle = E_n\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle \quad (3.53)$$

Isolando  $\psi_m$ ;

$$\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle = \frac{\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R H|\psi_n\rangle}{(E_m - E_n)} \quad (3.54)$$

Como  $\vec{B} = i\langle\vec{\nabla}_R\psi_n|x|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle$  posso colocar um conjunto completo no meio que resultará em:

$$\vec{B} = i \sum_m \langle\vec{\nabla}_R\psi_n|\psi_m\rangle \times \langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle \quad (3.55)$$

Substituindo a equação (3.54) em (3.66) resulta em:

$$\vec{B} = i \sum_m \frac{\langle\psi_n|\vec{\nabla}H|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\vec{\nabla}H|\psi_n\rangle}{(E_m - E_n)^2} \quad (3.56)$$

$\vec{B}$  da informação de como a forma que o Hamiltoniano varia com o tempo (como eles variam com estes parâmetros). Em outras palavras, se tem um sistema que foi cíclico e saiu de uma posição na qual o campo era nulo, saiu novamente de uma posição variando e voltou para um campo nulo. A função de onda, era do m-ésimo e continuou, mas retornou de um sistema de campo nulo, só que não é a mesma função de onda, pois pela consequência da variação dos parâmetros lembra uma espécie de campo magnético e recebe uma fase geométrica.

Um fenômeno a qual podemos observar algo análogo é o efeito Aharonov-Bohm. Em um caso mais simples, partículas carregadas, como elétrons, ao passarem ao redor de um solenoide longo, sofrem uma mudança de fase na função de onda, causada pelo potencial vetor associado ao campo magnético presente no solenoide. Isso resulta em uma alteração na fase da função de onda da partícula. A fase adquirida agora é chamada de fase de Aharonov-Bohm que surgiu na função de onda ao resolvermos o problema de um elétron que se propaga em uma região onde o campo magnético está 'concentrado' em uma área específica do espaço. Mesmo que o campo magnético esteja restrito a uma determinada região, nas áreas onde ele é nulo ainda existe a presença de um potencial vetor. O ponto

crucial no estudo da fase de Aharonov-Bohm é que, embora o potencial vetor não seja uma quantidade física diretamente associada a uma interação, ele influencia a função de onda nas regiões onde o campo magnético é nulo (AHARONOV; BOHM, 1959).

Figura 3 – Imagem retirada do artigo original do Efeito Aharonov-Bohm, onde é mostrado o esquema do experimento com o solenoide.

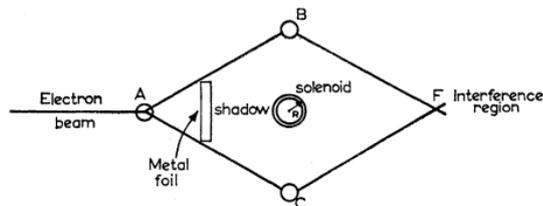


FIG. 2. Schematic experiment to demonstrate interference with time-independent vector potential.

**Fonte:** Y. Aharonov e D. Bohm. (1959).

Para demonstrar o fenômeno envolvido e, conseqüentemente, sua fase, utilizaremos o exemplo do solenoide onde suponhamos o seguinte: um solenoide ideal com comprimento  $l \rightarrow \infty$ , ou seja, infinitamente longo, o que garante que o campo magnético esteja confinado apenas no interior do solenoide. Na equação de Schrödinger,  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ,  $\vec{A}$  é o potencial vetor. Como o campo no solenoide está na direção  $Z$ , o campo magnético será dado por:

$$\vec{B} = B\hat{z}; r \in [0, a] \quad (3.57)$$

Faz-se uma escolha tal que o rotacional fornece o campo  $\vec{B}$  na direção  $\hat{z}$ . Essa escolha, chamada de transformação de Gauge, garante que a equação de Schrödinger seja invariante sob tal transformação. Não apenas nesse caso, mas outras escolhas podem ser feitas para garantir a invariância da equação de Schrödinger, se satisfizerem a condição  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . Isso pode ser feito da seguinte maneira:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}f \quad (3.58)$$

Como existem infinitas formas de escolher o potencial vetor  $\vec{A}$ , ele, por si só, não possui significado físico e não pode ser medido diretamente. O que possui significado físico e pode ser medido é o campo  $\vec{B}$ . Para a região  $[0, a]$ , ou seja, dentro do solenoide, o campo  $\vec{B}$  é não nulo, mas precisamos analisar a região  $[a, b]$ , que corresponde ao espaço fora do solenoide, onde o campo  $\vec{B} = 0$ . O problema surge quando  $r = a$ , pois o potencial vetor deve ser contínuo, tanto dentro quanto fora do solenoide. No entanto, nessa situação, ele se torna descontínuo. Agora, é necessário definir o potencial vetor para a região onde  $r > a$ . Portanto, precisamos de um potencial vetor que, quando  $r = a$ , tenha a solução

$\vec{A} = \frac{1}{2}Br\vec{\varphi}$ , mas cujo rotacional seja zero, já que o campo fora do solenoide é nulo. Uma das opções para esse potencial é:

$$\vec{A} = \frac{\Phi\vec{\varphi}}{2\pi r}, \Phi = \pi a^2 B \quad (3.59)$$

Agora analisando um elétron fora do solenoide. Pelo fato de existir o potencial vetor, irá se ter uma diferença no sistema. E o Hamiltoniano é dado por:

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - q\vec{A})^2 + v(r) \quad (3.60)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + \left( \frac{q\Phi}{2\pi r} \right)^2 + 2i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \right) \quad (3.61)$$

$$(3.62)$$

Para uma região onde  $r = b$ :

$$H = \frac{1}{2m} \left[ -\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \left( \frac{q\varphi}{2\pi b} \right)^2 + 2i\hbar \frac{\Phi}{2\pi b^2} \frac{d}{d\varphi} \right] \quad (3.63)$$

Portanto, dada a equação de Schrodinger:

$$H\psi = E\psi \quad (3.64)$$

$$\left[ -\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{2i\hbar\phi q}{2\pi\hbar} \frac{d}{d\varphi} + \left( \frac{q\phi}{2\pi\hbar} \right)^2 \right] \psi = E \frac{2m\hbar^2}{\hbar^2} \psi \quad (3.65)$$

Da equação acima, o lado esquerdo podemos definir um termo  $\beta$  e e outro  $\xi$  como sendo:

$$\beta = \frac{\phi q}{2\pi\hbar},$$

e

$$\xi = \frac{2mb^2}{\hbar^2} E - \beta^2,$$

E, portanto, a equação ficará na forma de :

$$-\frac{d}{d\varphi^2} \psi + 2i\hbar\beta \frac{d\psi}{d\varphi} - \xi\psi = 0. \quad (3.66)$$

Na equação acima pode-se colocar a solução do  $\psi$  do primeiro termo do lado

esquerdo como uma exponencial do tipo:

$$\psi = Ae^{i\lambda\varphi}. \quad (3.67)$$

Substituindo a equação (3.67) na equação (3.66) resulta:

$$-\lambda^2 Ae^{i\lambda\varphi} - 2\beta\lambda e^{i\lambda\varphi} - \epsilon e^{i\lambda\varphi} = 0 \quad (3.68)$$

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{4\beta^2 - 4\epsilon} \quad (3.69)$$

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\frac{2mEb^2}{\hbar^2}}. \quad (3.70)$$

A exponencial do tipo da equação (3.67) deve-se ter uma periodicidade em  $2\pi$  pois  $\varphi$  é uma coordenada angular, portanto  $\lambda$  tem uma conexão com o  $E$ , mas, ao mesmo tempo, não se pode ser qualquer valor, pois se for não se pode dizer que é periódico então deve satisfazer:

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \epsilon} = \beta \pm \sqrt{\frac{2mEb^2}{\hbar^2}}. \quad (3.71)$$

Para resolver a condição de contorno  $e^{i\lambda(\varphi+2\pi)}$

$$e^{i\lambda(\varphi+2\pi)} = e^{i\lambda\varphi} = e^{i\lambda\varphi} e^{i\lambda 2\pi} \quad (3.72)$$

Se o segundo e o terceiro termo da equação acima cancelarem o que sobra é que:

$$e^{i\lambda 2\pi} = 1, \lambda = 1, 2, 3, \dots \quad (3.73)$$

E, portanto  $\lambda = n$  deve ser um número.

$$n = \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} \Rightarrow n - \beta = \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} \Rightarrow \quad (3.74)$$

$$\Rightarrow 2mE = (n - \beta)^2 \frac{\hbar^2}{b^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2mb^2} (n - \beta)^2 \quad (3.75)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left( n - \frac{\phi q}{2\pi\hbar} \right)^2. \quad (3.76)$$

Mas,  $\beta = \frac{\phi q}{2\pi\hbar} = \left(\frac{\phi q}{2\pi\frac{\hbar}{2\pi}}\right)^2 = \left(\frac{\phi q}{\hbar}\right)^2 \Rightarrow \phi_0 = \left(\frac{\phi}{\phi h}\right)^2$  onde  $\phi_0$  é o *quantum de fluxo* no que resulta na seguinte energia:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2. \quad (3.77)$$

Se mantivermos o raio  $b$  fixo, o sistema físico (o elétron) não poderá sair desse raio, por exemplo, em um anel de raio  $b$ , onde existe um solenoide no centro. Nesse caso, pode-se afirmar que a energia do elétron terá um formato parabólico em relação ao fluxo magnético.

Embora não exista campo magnético fora do solenoide, há um potencial vetor que se manifesta fora dele, simplesmente pelo fato de sua existência. Quando o campo magnético dentro do solenoide aumenta, a energia do elétron começará a oscilar, e essas oscilações são conhecidas como *oscilações de Aharonov-Bohm nas energias*.

O potencial vetor gerado pelo campo magnético dentro de um solenoide afeta as energias de um elétron fora dele. À medida que o fluxo magnético aumenta, as energias oscilam, resultando em níveis de energia que têm um formato parabólico. Cada uma dessas parábolas possui um vértice deslocado para cada valor de  $n$ , onde  $n$  é o índice que multiplica a coordenada angular na solução da equação de Schrödinger. Nesse contexto,  $n$  pode ser interpretado como um análogo ao momento angular (DE MELLO; DOS SANTOS, 1997).

O que acontecerá com a função de onda dos elétrons é que a equação de Schrödinger dependente do tempo que as descreve será:

$$\frac{1}{2m} [(\vec{p} - q\vec{A}) + v] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.78)$$

A ideia é que utilizando uma transformação de calibre para eliminar o potencial vetor na equação para que caso se consiga troca a função de onda por algo como:

$$\psi = e^{ig}\psi'; g = \frac{q}{\hbar} \int_{\theta}^r A(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.79)$$

O que faz com que a equação de Schrödinger perca o termo do potencial vetor. De modo que a equação irá ficar em função de  $\psi'$ . Isso pode ser demonstrado partindo da equação (3.78) com a mudança de que  $\vec{p} = i\hbar\vec{\nabla}$  e verificando como  $\vec{\nabla}$  atua sobre  $\psi = e^{ig}\psi'$ .

$$\vec{\nabla}\psi = e^{ig}i\frac{q}{\hbar}\vec{A}\psi' + e^{ig}\vec{\nabla}\psi' \quad (3.80)$$

O gradiente do  $\psi$  será o gradiente de  $\psi = e^{ig}\psi'$

$$\vec{\nabla}\psi = e^{ig\frac{iq}{\hbar}\vec{A}}\vec{\nabla}\psi' + e^{ig}\vec{\nabla}\psi' \quad (3.81)$$

$$\left(\vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar}\vec{A}\right)\psi = e^{ig}\vec{\nabla}\psi' \quad (3.82)$$

$$(\vec{p} - q\vec{A})\psi = \frac{\hbar}{i}e^{ig}\vec{\nabla}\psi' \quad (3.83)$$

Agora é saber quanto vale a equação:

$$(\vec{p} - q\vec{A})(\vec{p} - q\vec{A})\psi = (\vec{p} - q\vec{A})\psi \quad (3.84)$$

$$(\vec{p} - q\vec{A})(\vec{p} - q\vec{A})\psi = (\vec{p} - q\vec{A})\frac{\hbar}{i}e^{ig}\vec{\nabla}\psi' \Rightarrow \frac{i\hbar\hbar}{i}(e^{ig}i\vec{A}\frac{q}{\hbar}\vec{\nabla}\psi' + e^{ig}\vec{\nabla}^2\psi') \quad (3.85)$$

$$(\vec{p} - q\vec{A})^2\psi = -\hbar^2e^{ig}\vec{\nabla}^2\psi' \quad (3.86)$$

Agora pode-se simplificar a equação de Schrödinger para:

$$\frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (3.87)$$

$$\frac{1}{2m}e^{ig}\vec{\nabla}^2\psi' + Ve^{ig}\psi' = i\hbar e^{ig}\frac{\partial\psi'}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi' + V\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}. \quad (3.88)$$

Significa que agora o problema é mais simplificado para uma forma para um problema sem campo, mas, a função de onda é verdadeira é  $\psi = e^{ig} \cdot \psi'$  onde  $e^{ig}$  é a fase de Aharonov. . Com o uso da transformação de calibre, foi possível fazer uma equação de Schrödinger mais simples. Mas que sua solução é uma função de onda que se altera por uma fase. A consequência disto é que no problema do solenoide, o elétron que passa pela região I tem uma fase diferente do elétron que passa pela região II. Pois o  $\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}\hat{\varphi}$  depende da direção do potencial.

$$g = \pm\frac{q}{\hbar}\int_{\theta}^r A(\vec{r})d\vec{r} = \pm\frac{q}{\hbar}\frac{\phi}{2\pi r}\int_0^\pi d\varphi = \pm\frac{q\phi}{2\pi} \quad (3.89)$$

$$\Delta g = \frac{q\phi}{\hbar} \quad (3.90)$$

A última equação é a diferença de fase o que se conclui é que, se for aumentando a corrente do solenoide se aumenta o campo e se muda o  $\vec{B}$  que gera o fluxo. Mudando o fluxo faz com que  $\Delta g = \frac{q\phi}{\hbar}$  mude.

A fase vem de um potencial que não deveria ter um sentido físico, mas dentro da própria equação o que se está influenciando é o fluxo magnético, o fluxo magnético tem o sentido físico. Mas com isso tem uma conexão entre o potencial vetor e fluxo magnético,

entre o fluxo magnético e uma fase.

Uma pergunta que se pode fazer é se a fase de Berry e a de Aharonov-Bohm são o mesmo, se um sistema é descrito por um Hamiltoniano da equação:

$$\frac{1}{2m}[(\vec{p} - e\vec{A}) + v]\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{1}{2m}[(\vec{p} - e\vec{A}) + v]\psi_n = E\psi_n \quad (3.91)$$

A última equação é colocada sobre autoestados e pode-se resolver a equação com a solução de  $\psi_n = e^{ig}\psi'_n$  e agora se quer saber se é uma fase diferente da de Berry. Na ideia de Berry, o "espaço" ao redor do elétron está variando no tempo. E isso entra na equação de Schrödinger como um potencial que estará variando com o tempo.

$$\gamma = i \int A(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.92)$$

Onde,

$$\vec{A} = i\langle \psi_n | \vec{\nabla}_{R_n} \psi_n \rangle \quad (3.93)$$

O que está sendo alterado na ideia de Berry é que se tem uma coordenada do centro da caixa que está sendo alterada e tem um potencial vetor do campo magnético  $A' = \frac{\phi}{2\pi R} \hat{\varphi}$ .

Deve se verificar se o potencial vetor da fase de Berry é o mesmo do campo magnético. Ou seja, se  $\vec{A}' = \vec{A}$  ou se  $\gamma = g$ . E partindo do parâmetro que está variando  $\vec{R}$ :

$$\frac{1}{2m}[(\vec{P} - e\vec{A}') + V]\psi_n = E\psi_n \quad (3.94)$$

Onde  $\psi_n = e^{ig}\psi'_n$  e  $g = \frac{q}{\hbar} \int_0^R A(\vec{r}) d\vec{r}$  e o potencial vetor de Berry é dado por:

$$\vec{A} = i\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle$$

E, portanto:

$$\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle = \int e^{-ig}\psi'(r-R)^* \left[ -\frac{iA'}{\hbar} q\psi'_n e^{ig} + e^{ig} \vec{\nabla}_R \psi' \right] \quad (3.95)$$

$$\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle = -i\frac{\vec{A}}{\hbar} q + \int \psi' \vec{\nabla}_R \psi d\vec{r} \quad (3.96)$$

Esse Bra-ket na teoria de Berry é o potencial vetor de Berry.

$$A = i\langle\psi_n|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle = i(-i)A'\frac{q}{\hbar} \quad (3.97)$$

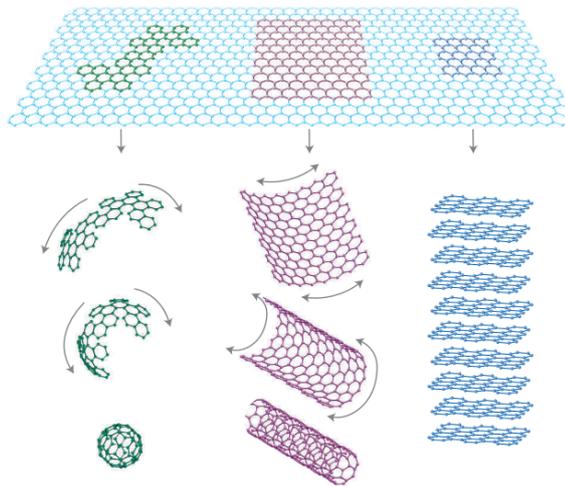
Prova-se que  $g$  é um caso particular de  $\gamma$ . Aharonov e colaboradores demonstraram que  $g$  é, de fato, um caso particular da fase  $\gamma$  de Berry. O cálculo da fase de Berry, dado por  $\langle\psi_n|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle$ , mostra que o vetor potencial encontrado é, na verdade, o mesmo vetor potencial do efeito Aharonov-Bohm. Dessa forma, conclui-se que a fase de Aharonov-Bohm e a fase de Berry são apenas duas maneiras diferentes de observar o mesmo fenômeno.

Portanto, o que foi apresentado neste capítulo e no anterior fornece uma boa base de referência para as discussões do próximo. Os elementos abordados até o momento, como a fase de Berry e o efeito Aharonov-Bohm, terão um papel importante neste trabalho. Em particular, diante de defeitos topológicos em folhas de grafeno, os elétrons na rede cristalina sofrerão alterações nas suas funções de onda, e será possível demonstrar como essas mudanças ocorrem.

## 4 MODELANDO DEFEITOS NO GRAFENO

Nas últimas décadas, tem-se estudado bastante as estruturas cristalinas bidimensionais, ou seja, cristais com espessura de um átomo. Nesse contexto, materiais 2D como o grafeno — pioneiro nesse tipo de estrutura — abriram portas para estudos e descobertas na área de física da matéria condensada, permitindo a identificação de outros nanomateriais com algumas semelhanças. Um exemplo é o borofeno, que apresenta uma estrutura semelhante à do grafeno, com uma fase estrutural em formato de favo de mel (PENG et al., 2017; ALVAREZ-QUICENO et al., 2017; WANG et al., 2016; PIAZZA et al., 2014).

Figura 4 – O grafeno pode servir como base estrutural para outros alótropos.



**Fonte:** Geim, Andre K., and Konstantin S. Novoselov. "The rise of graphene." *Nature materials* 6.3 (2007): 183-191.

Em um cristal, é comum haver uma quantidade significativa de defeitos, os quais desempenham um papel crucial nas propriedades do material. Quando ocorre uma mudança na estrutura do cristal, conhecida como quebra de simetria, devido à presença desses defeitos, as propriedades do material podem ser alteradas. Existem diversas abordagens para descrever defeitos em cristais, e uma delas é a teoria geométrica dos defeitos, descrita no Capítulo 1, similar ao que é aplicado na gravitação tridimensional. Esse formalismo matemático permite descrever e classificar defeitos de maneira mais precisa e será utilizado ao longo deste trabalho.

Até o momento, definimos o que é a fase geométrica de Berry e também o formalismo matemático formulado por Katanaev e Volovich para descrever defeitos em cristais com métrica não trivial e análoga ao que é visto na gravitação. Assim, foi discutido como a mudança na topologia de um meio, causada por um defeito, impacta consideravelmente o cristal. C. Furtado e colaboradores (FURTADO; BEZERRA; MORAES, 2000) demonstraram ser possível obter uma fase geométrica para elétrons na presença de um

defeito de deslocamento do tipo parafuso, com comportamento semelhante ao dos elétrons quando submetidos a um fluxo magnético. Eles partiram de uma métrica baseada na teoria dos defeitos de Katanaev e Volovich, que contém um deslocamento do tipo parafuso em coordenadas cilíndricas.

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx_j = (dz + \beta d\phi)^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\phi^2 \quad (4.1)$$

Onde  $\beta = \frac{b}{2\pi}$  é um parâmetro relacionado ao vetor de Burgers  $\vec{b}$ . A torção a qual está associada corresponde a uma singularidade cônica na origem onde o único componente diferente zero do tensor de torção é:

$$T^1 = 2\pi\beta\delta^2(\rho)d\rho \wedge d\phi, \quad (4.2)$$

$\delta^2(\rho)$  é a função delta bidimensional no espaço plano. Com a densidade superficial do vetor de Burgers na teoria clássica da elasticidade é possível mostrar que a geometria tridimensional do meio tem característica de uma torção não trivial onde o vetor é:

$$\int_{\Sigma} T^1 = \oint_S e^1 = 2\pi\beta = b. \quad (4.3)$$

Adotando as seguintes triádes para a métrica:  $e^1 = dz + \beta d\phi$ ,  $e^2 = d\rho$  e  $e^3 = \rho d\phi$  onde a torção está relacionada com tais objetos por:

$$\mathbf{T} = d\mathbf{e} + \mathbf{\Gamma}^{(L)} \wedge \mathbf{e}. \quad (4.4)$$

Onde  $\mathbf{\Gamma}^{(L)}$  é a conexão de Lorentz. A equação de Schrödinger para este problema é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \partial_z^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho \partial_\rho) + \frac{1}{\rho^2} (\partial_\phi - \beta \partial_z)^2 \right] \psi = E\psi \quad (4.5)$$

Onde sua solução pode ser obtida usando **ansatz** [\[1\]](#), onde tem como:

$$\psi = C e^{il\phi} e^{ikz} R(n) \quad (4.6)$$

---

<sup>1</sup>um ansatz é um palpite que se verifica depois por seus resultados.

Em que  $C$  é a constante de normalização e substituindo a solução acima na eq. (4.5) obtemos:

$$[\rho\partial_\rho(\rho\partial_\rho) - (l - \beta k)^2 + (\varepsilon^2 - k^2)\rho^2]R(\rho) = 0. \quad (4.7)$$

Onde é uma equação diferencial de Bessel com soluções do tipo:

$$R_{lk}^{Reg}(\lambda\rho) \propto (\pm 1)^l J_{|l-\beta k|}(\lambda\rho). \quad (4.8)$$

Onde os termos  $m^2 = (l - \beta k)^2$  e  $\lambda^2 = \varepsilon - k^2$ , e o sinal positivo corresponde ao caso  $l \geq -[\beta k]$  e o sinal negativo ao  $l < -[\beta k]$ . A mudança de fase associada ao espalhamento de uma única partícula é dada por:

$$\delta_m = \frac{\pi}{2}|l - \beta k| + \frac{\pi}{2}|l|. \quad (4.9)$$

E a amplitude de espalhamento é associada ao problema é:

$$f(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\lambda}} \left[ 2\pi\sigma(\varphi - \pi)(1 - \cos(\pi\beta k)) - ie^{iN(\varphi - \pi)} \sin(\pi\beta k) \frac{e^{-i\frac{\phi}{2}}}{\cos(\frac{\varphi}{2})} \right]. \quad (4.10)$$

A expressão acima é análoga à equação do efeito Aharonov-Bohm, mas, neste caso, o vetor de Burgers desempenha o papel do fluxo magnético, estando associado ao fluxo de torção do defeito. Isso foi demonstrado na equação (4.2), que mostra que a torção é zero em todas as regiões, exceto no defeito. É um comportamento semelhante ao observado no efeito Aharonov-Bohm, onde o campo magnético é zero em todo o espaço, exceto no solenoide (FURTADO; BEZERRA; MORAES, 2000).

A análise realizada por C. Furtado, V. B. Bezerra e F. Moraes destaca que a torção apresenta um comportamento semelhante à intensidade de campo no caso eletromagnético, caracterizando a manifestação do efeito Aharonov-Bohm no espalhamento de elétrons por um deslocamento de parafuso, fenômeno conhecido como efeito elástico de Aharonov-Bohm.

Agora para obter a fase de Berry considera-se inicialmente a transformação de coordenadas que transforma a métrica da equação (4.1) em uma métrica plana com coordenadas  $(Z, \rho, \phi)$  é:

$$z \rightarrow Z = z + \frac{b}{2\pi}\phi. \quad (4.11)$$

E a métrica resultará em:

$$ds^2 = dZ^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\phi^2. \quad (4.12)$$

E agora teremos a equação (4.6) na forma de:

$$\psi = e^{ikZ+il\phi} \quad (4.13)$$

$$\psi = e^{ikZ+in\phi}. \quad (4.14)$$

O que nos dará um momento angular efetivo:

$$l_{eff} = n - \beta k, \quad (4.15)$$

com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  que depende do parâmetro do deslocamento, tais transformações são análogas às transformações de gauge onde eliminam o potencial do efeito (AB) eletromagnético, neste caso as transformações fazem o vetor de Burgers sumir da equação Schrödinger devido à mudança das condições de contorno. A equação (4.14) tem o significado de que quando a partícula circunda o deslocamento do parafuso, a função de onda muda e ficará do tipo:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{2\pi i l_{eff}} \psi = e^{[2\pi i(n-\beta k)]} \psi, \quad (4.16)$$

uma consequência do momento angular é que podemos definir seu operador:

$$\hat{l}_{eff} = i(\partial_\phi + \beta\partial_z). \quad (4.17)$$

Para calcular a fase de Berry em um meio que contem um defeito do tipo deslocamento de parafuso consideramos uma evolução quântica de uma única partícula na métrica descrita onde a equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(R_i(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (4.18)$$

Onde  $H(R_i(t))$  é o hamiltoniano do sistema que depende de parametros  $\mathbf{R}(t) = R_i$ . Para calcular a fase de Berry para um elétron na presença de um defeito adota-se o método de fator de fase de Dirac para descrever a solução da equação de Schrödinger por:

$$i\hbar \frac{d\Psi(x, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \partial_z^2 + \frac{1}{\rho} (\partial_\rho \rho \partial_\rho) + \frac{1}{\rho^2} \partial_\phi^2 \right] \Psi(x, t) - \left[ \frac{2\beta}{\rho^2} \partial_z \partial_\phi + \frac{\beta^2}{\rho^2} \partial_z^2 \right] \Psi(x, t) \quad (4.19)$$

Onde a solução a partir do método do fator de Dirac pode ser do tipo:

$$\psi(\rho, \phi) = e^{ik\beta \int_\phi^{\phi_0} d\phi} \psi_0(\rho, \phi) \quad (4.20)$$

Em que  $\psi_0(\rho, \phi)$  é para o caso onde  $\beta = 0$ , ou seja, livre de defeitos, e a solução da eq. de Schrödinger resulta em:

$$\psi(t, \rho, \phi, z) = e^{\frac{iEt}{\hbar}} e^{ikz} \psi(\rho, \phi) \quad (4.21)$$

Considerando uma partícula quântica em uma caixa perfeitamente refletora, ela pode ser descrita por um pacote de ondas, sendo uma combinação linear de diferentes funções próprias do Hamiltoniano. Esses modos próprios são rotulados por  $n$ , o que implica que o comportamento  $z$  do momento linear será representado por  $K_n$ . O vetor  $\mathbf{R}$  orienta-se da origem do sistema de coordenadas, que está no defeito, até o centro da caixa.

Na ausência de defeitos, a função de onda correspondente ao modo  $n$  é dada por  $\psi_n(\mathbf{R} - \mathbf{x})$ , onde  $\mathbf{x}$  representa as coordenadas da partícula centrada em  $\mathbf{R}$ . Agora, se a caixa for transportada ao longo de um círculo  $C$ , tendo o defeito como centro, a função de onda será modificada conforme o movimento.

Considerando uma versão não abeliana da conexão graças a degeneração dos autovalores de energia, para calcular a fase de Berry temos que:

$$A_n^{IJ} = \langle \psi_n^I(\mathbf{R} - \mathbf{x}) | \nabla_R \psi_n^J(\mathbf{R} - \mathbf{x}) \rangle \quad (4.22)$$

$I$  e  $J$  são possíveis rótulos de degeneração. utilizando o fator de Dirac para analisar o produto interno obtém-se:

$$\langle \psi_n^I(R_i - X_i) | \nabla_R \psi_n^J(R_i - x_i) \rangle = \quad (4.23)$$

$$i \int_C dS \psi_n^{*I}(R_i - X_i) + \nabla_R \psi_n^J(R_i - x_i) [k_n \beta \psi_n^J(R_i - X_i) \nabla_R \psi_n^J(R_i - x_i)] \quad (4.24)$$

$$\langle \psi_n^I(R_i - X_i) | \nabla_R \psi_n^J(R_i - x_i) \rangle = i k_n \beta \delta_{IJ} \quad (4.25)$$

E a partir da equação acima pode-se obter a fase de Berry:

$$\gamma_n(C) = 2\pi \beta k_n. \quad (4.26)$$

Esta análise feita por Furtado, Bezerra e Moraes (2000). mostra que é possível demonstrar a existência de uma fase de Berry ou também chamada de fase geométrica em meios com deslocamentos por meio da teoria geométrica dos defeitos desenvolvida por Katanaev e Volovich.

Neste artigo, discute-se a semelhança entre o efeito Aharonov-Bohm (AB) eletromagnético e o elástico. Esses efeitos podem ser observados mais claramente em uma abordagem utilizando dimensões extras, como é o caso na teoria de Kaluza-Klein. Tal teoria foi proposta para aplicação na física de altas energias, com o intuito de junção da gravidade e eletromagnetismo a partir de uso de dimensões extras. Posteriormente foi substituída por teorias modernas como a teoria das cordas, mas que pode ser muito útil ainda para aplicação na matéria condensada já que se considera a teoria geométrica dos defeitos em sólidos como uma analogia a gravitação, ou seja, a teoria de Kaluza e Klein pode ser utilizada na teoria de Katanaev e Volovich assim podendo ser aplicada como é no caso da gravidade (BAKKE; PETROV; FURTADO, 2012).

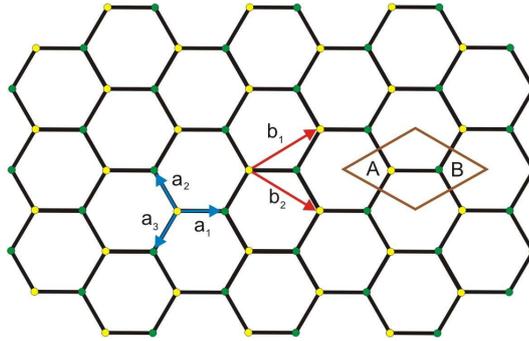
Quando aplicada no contexto do grafeno, conforme discutido de maneira mais detalhada na referência (BAKKE; PETROV; FURTADO, 2012), mostra-se a obtenção de uma fase geométrica em meios com defeitos topológicos no grafeno. Os autores destacam que essa abordagem, ao utilizar uma dimensão extra compacta, permite estender a métrica bidimensional que descreve um defeito topológico em uma camada de grafeno para uma métrica tridimensional. A adição dessa dimensão extra possibilita descrever um grau de liberdade para o ponto de Fermi, permitindo calcular a fase geométrica adquirida pela função de onda de um férmion sem massa, que surge da mistura dos pontos de Fermi.

No capítulo anterior deste trabalho, foram discutidas as fases geométricas e o efeito Aharonov-Bohm. Esses fenômenos são possíveis quando a função de onda da partícula apresenta uma evolução adiabática no sistema. Aharonov e Anandan estenderam posteriormente o conceito de fase geométrica para qualquer evolução cíclica, o que ficou conhecido como fase de Aharonov-Anandan. Assim, no contexto do grafeno, a fase obtida é precisamente uma fase quântica resultante de uma evolução cíclica.

Para alcançar tal resultado, os autores consideraram defeitos no grafeno que podem ser gerados por um processo de Volterra, ou "corta e cola", conforme demonstrado no Capítulo 1 (KATANAEV,VOLOVICH, 1992; KATANAEV, 2005).

Portanto, para demonstrar como se obtém a fase geométrica no grafeno, é preciso inicialmente descrever sua estrutura, representada por duas sub-redes, A e B, com os vetores da célula unitária  $\mathbf{b}_1$  e  $\mathbf{b}_2$ . Os vetores  $a_i$  representam os vizinhos mais próximos da rede, como mostra a imagem abaixo:

Figura 5 – Sub-rede do Grafeno



**Fonte:** Bakke, K., A. Yu Petrov, and C. Furtado. "A Kaluza–Klein description of geometric phases in graphene." *Annals of Physics* 327.12 (2012): 2946-2954

Considerando apenas as interações do vizinho mais próximo na aproximação de ligação apertada ou ligação forte (ASHCROFT; MERMIN, 2011). O salto de um elétron em uma rede planar de favo de mel é descrito pelo hamiltoniano:

$$H - t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) \quad (4.27)$$

O operador  $a_i^\dagger$  cria um elétron em um local  $i$ ,  $a_j$  o aniquila em um local  $j$  e  $t$  corresponde a amplitude de salto.

Diagonalizando o Hamiltoniano usando a transformação de Fourier que reduz problemas de encontrar valores de energia para apenas o problema da diagonalização em uma célula unitária em que para  $a(\vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{i}} a_i$  resulta no Hamiltoniano:

$$H - t \int d^2k (a_A^\dagger(\vec{k}) a_B^\dagger(\vec{k})) \begin{pmatrix} 0 & \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_i} \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{A\vec{k}} \\ a_{B\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

a transformada de Fourier dos operadores  $a_{A\vec{k}}$  e  $a_{B\vec{k}}$  estão associados as sub-rede A e B.

Diagonalizando o último Hamiltoniano encontra-se a energia:

$$E = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{\sqrt{2}k_y}{2} + 4 \cos \frac{3k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2}} \quad (4.29)$$

para valores especiais isolados de  $k$ , os autovalores de energia da equação acima são

zero, esses pontos zeros são chamados de pontos de Fermi ou pontos  $k$ . E dessa energia é obtido seis pontos de Fermi onde dois deles são inequivalentes sendo selecionado os valores  $\vec{k}_+ = \frac{2\pi}{3}(1, \frac{1}{\sqrt{3}})$  e  $\vec{k}_- = -\frac{2\pi}{3}(1, \frac{1}{\sqrt{3}})$ . No grafeno a banda de estrutura consiste em uma de condução que é proximamente vazia e uma banda de valência totalmente preenchida, o que faz com que o Hamiltoniano tenha comportamento perto do nível de Fermi. Portanto, a superfície de fermi se reduz a dois pontos  $k$  localizados na zona de Brillouin. As propriedades do grafeno podem ser descritas pela teoria dos férmions livres num modelo contínuo baseado na equação de Dirac e dessa forma o Hamiltoniano terá como:

$$H_0 = i\hbar v_f(\sigma^x \partial_x + \sigma^y \partial_y) \quad (4.30)$$

onde  $v_f$  corresponde as velocidades de Fermi e  $\sigma^i$  corresponde as matrizes de spin de Pauli (atuando nos rótulos  $\mathbf{A}/\mathbf{B}$ ). Os estados desse sistema são denominados pela direção do vetor de onda  $\mathbf{k}$  e pelo índice  $\mathbf{A}$  ou  $\mathbf{B}$  para as sub-redes, dessa forma trata-se os estados na forma de  $|\mathbf{k}_\pm, \mathbf{A}\rangle$  e  $|\mathbf{k}_\pm, \mathbf{B}\rangle$ . O Hamiltoniano descreve a transferência de um elétron apenas da sub-rede  $A$  para a sub-rede  $B$  ou vice-versa.

Quando se fala de defeitos em grafeno, usualmente aqui nos referimos a defeitos chamados de volterra (cortar e colar) esses estão associadas a simetria da molécula durante sua criação (BAKKE; PETROV; FURTADO, 2012).. Esse tipo de defeito consiste em cortar uma sub-rede e colar em outra parte da rede de favor de mel fazendo com se gere uma quebra na simetria do sistema e assim gerando um defeito, de forma que onde se tinha um hexágono agora se tem heptágonos ou pentágonos. E isso pode ser visto nas equações abaixo que representam campos de gauge fictícios.

$$\oint \omega_\mu dx^\mu = -\frac{\pi}{6} \sigma^z \quad (4.31)$$

$$\oint A_\mu dx^\mu = \frac{\pi}{2} \tau^y \quad (4.32)$$

A primeira equação do primeiro campo  $\omega_\mu$  descreve o déficit angular de cones que surge quando um espinor é transportado paralelamente ao redor do defeito. A segunda equação representa o fluxo de  $K$ -spin que constitui a mistura dos pontos de Fermi  $K_+$  e  $K_-$ , quando um setor é removido da camada de grafeno devido ao corte para o processo de Volterra. Essa segunda equação, em especial, pode ser obtida de diferentes formas. Uma abordagem é a utilização de outras técnicas por meio da teoria de Kaluza-Klein para mostrar a transição de fase na função de onda, a fim de descrever uma forma geométrica que leva a um segundo fluxo quântico ( GONZALEZ; GUINEA; VOZMEDIANO, 1993).

Na física de altas energias, um dos problemas mais intrigantes é a tentativa de

unificar a gravidade com o eletromagnetismo. Em muitas teorias que tentam explicar essa unificação, é comum utilizar dimensões extras além das já conhecidas. Em 1921, em busca dessa unificação, Kaluza (KALUZA, 1921). sugeriu que o universo poderia ter dimensões espaciais adicionais, compactadas em um espaço compacto mínimo. Ele propôs um espaço-tempo penta-dimensional, ou seja, com quatro dimensões conforme descritas pela teoria da relatividade geral de Einstein, além de uma dimensão extra.

Klein (KLEIN, 1926) propôs que essa dimensão extra  $y$  fosse compactada com topologia circular muito pequena e com propriedade de periodicidade ( $T$ ), tal que  $y' = y + T$ . Essa teoria é uma maneira de formular a relatividade geral em dimensões maiores que quatro, ou (3+1). (KALUZA, 1921; KLEIN, 1926; GONZALEZ; GUINEA; VOZMEDIANO, 1993)

Na equação (4), um segundo fluxo quântico não é conhecido, mas, com base na referência (GONZALEZ; GUINEA; VOZMEDIANO, 1993), pode-se descrever esse segundo fluxo partindo da teoria de Kaluza-Klein, onde se descrevem os graus de liberdade do ponto de Fermi ou do  $K$ -spin por meio dessa teoria.

Tomando um elemento de linha infinitesimal na presença de um campo não abeliano:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu + (dy + \kappa B_\mu dx^\mu)^2, \quad (4.33)$$

onde  $A_\mu$  indica o potencial eletromagnético,  $\kappa$  é chamada de constante de Kaluza,  $\mathcal{G}_{\mu\nu}(x)$  é o tensor métrica em dimensão (2+1),  $y$  representa a dimensão extra. Em uma aproximação em folha de grafeno onde se introduz a dimensão extra  $y$  na métrica bidimensional como:

$$ds^2 = -dt^2 + d\rho^2 + \eta^2 \rho^2 d\varphi^2 + (dy + \frac{n_\Omega}{2} \rho d\varphi)^2, \quad (4.34)$$

$\eta$  é o parâmetro ao qual relaciona ao angulo com deficit onde está correspondente ao setor angular que se é “colado ou cortado” para formar o defeito. Sem a presença da dimensão extra, a equação (6) descreve fases quânticas geométricas. n pode ser relacionado com o número setor removidos ou inseridos na folha de grafeno:

$$\eta = 1 - \frac{n_\Omega}{6}. \quad (4.35)$$

Para intervalo como  $0 < n < 1$  relacionado a remoção de um trecho da folha para formar o defeito e o intervalo  $1 < n < \infty$  está ligado a implantação de uma seção para formar o defeito, o  $n_\Omega$  mostra o número de setores que podem ser cortados ou colados

para construção de cones de grafeno [14,2]. Para estudar a relação da teoria de Kaluza-Klein em férmions sem massa no grafeno é preciso usar um pouco da teoria quântica de campos no espaço-tempo. Na teoria de Kaluza-Klein, a base não coordenada é escrita também como  $\hat{\theta}^a = e^a_\mu(x) dx^\mu$  e  $e^a_\mu(x)$  são chamadas de tétradas em um espaço-tempo ( $\mu = t, \rho, \varphi, y$ ) onde  $y$  é a dimensão extra. Essa base satisfaz a equação:

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(x) = e^a_\mu(x) e^b_\nu(x) n_{ab} \quad (4.36)$$

$$R_{\rho,\varphi}^{\rho,\varphi} = \frac{1-\eta}{4\eta} \delta_2(\vec{r}), \quad (4.37)$$

$n_{ab} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$  é um tensor no espaço de Minkowski, estabelecendo que  $\hat{\theta}^0 = dt, \hat{\theta}^1 = d\rho, \hat{\theta}^2 = n\rho d\varphi$  e  $\hat{\theta}^3 = \frac{n\Omega}{2} \rho d\varphi + dy$ . Onde as, tétradas podem ser escritas na forma:

$$e^a_\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta\rho & 0 \\ 0 & 0 & \frac{n\Omega}{2}\rho & 1 \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

$$e^\mu_a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\eta\rho} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{n\Omega}{2\eta} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

No contexto para a equação de Dirac para um férmion sem massa na teoria de Kaluza-Klein pode ser mostrada como:

$$i\gamma^\mu \left[ \partial_\mu + \frac{i}{4} \omega_{\nu ab}(x) \Sigma^{ab} \right] \Psi = 0, \quad (4.40)$$

onde  $\Sigma^{ab} = \frac{i}{2} \gamma^a \gamma^b$ , as matrizes de Dirac satisfazem a relação,  $\gamma^a, \gamma^b = -2n^{ab}$  isso significa que as matrizes  $\gamma^a$  são definidas no referencial e correspondentes as matrizes de Dirac padrão dadas no espaço-tempo de Minkowski. Pode-se construir as matrizes de Dirac 4x4 a partir de 2x2 que atuam sobre os índices de pontos de Fermi e rótulos  $A/B$  e isso pode ser mostrado como:

$$\gamma^0 = \tau^1 \otimes I = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

$$\gamma^i = -i\tau^2 \otimes \sigma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \tau^3 \otimes I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

$$\Sigma^1 = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

$I$  é a matriz identidade  $2 \times 2$  e  $\vec{\Sigma}$  é o vetor de spin,  $\sigma^i$  são matrizes de Pauli que satisfazem a relação  $(\sigma^i\sigma^j + \sigma^j\sigma^i) = 2n^{ij}$  ( $i, j, k = 1, 2, 3$ ), essa forma de representar as matrizes de Dirac são chamadas de Weyl ou Quiral. O termo  $\omega_{\mu ab(x)}$  satisfaz a equação de Cartan:

$$d\hat{\theta}^3 + \omega_a^b \wedge \hat{\theta}^b = 0. \quad (4.45)$$

Os componentes não nulos podem ser escritos como:

$$\omega_1^2 = -\omega^1_2 = -\omega_{12}^\omega(x)d\varphi = \eta d\varphi \quad (4.46)$$

$$\omega_3^1 = -\omega^3_1 = \omega_{13}^\omega(x)d\varphi = -\frac{n_\Omega}{2}d\varphi. \quad (4.47)$$

Portanto, nesse contexto a equação de Dirac para um férmion sem massa pode ficar na forma:

$$i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\gamma^1 \left( \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\partial \rho} \right) \Psi + i \frac{\gamma^2}{\eta \rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} - i\gamma^2 \frac{n_\Omega}{2\eta} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + i\gamma^3 \frac{\partial \Psi}{\partial y} - \frac{n_\Omega}{4\eta \rho} \gamma^0 \gamma^5 \Psi = 0 \quad (4.48)$$

Como a coordenada extra é periódica, pode-se expandir o espinor de Dirac em modos de Fourier em relação à dimensão extra:

$$\Psi(t, \rho, \varphi, y) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i l \frac{y}{l}} \Psi_l(t, \rho, \varphi) \quad (4.49)$$

O que se tem interesse é na fase geométrica, e para obtê-la utiliza-se do método de fator de fase de Dirac. Supondo que o espinor de Dirac seja escrito como:

$$\Psi_l(t, \rho, \varphi) = e^{i\phi} \Psi_l^0(t, \rho, \varphi), \quad (4.50)$$

onde  $\phi$  é a fase que a função de onda adquire e  $\Psi_l^0$  é a solução para a equação de Dirac. Como procuramos para férmions massivos como o elétron, a fase geométrica tem a forma de:

$$\phi = \oint \left( \frac{1}{2} \eta \Sigma^3 - \frac{n_\Omega}{4} \Sigma^2 \right) d\varphi \quad (4.51)$$

$$\phi = \pi \left( 1 - \frac{n_\Omega}{2} \pi \Sigma^2 \right) \quad (4.52)$$

A fase geométrica, por não ser obtida por uma evolução cíclica em vez de uma aproximação adiabática, é do tipo Aharonov-Anandan.

Para a descrição do fulereno, que é um derivado do grafeno, pode ser feita similarmente à apresentada anteriormente para descrever defeitos, utilizando a teoria de dimensões extras. A diferença agora é que, no caso do fulereno, em vez de coordenadas polares, utilizam-se coordenadas esféricas, de modo que, na métrica da teoria de dimensões extras, isso pode ser escrito como:

$$ds^2 = V_f^2 dt^2 - R^2 d\theta^2 - \alpha^2 R^2 \sin^2 \theta d\phi^2 - \left( dy + \frac{n_\Omega}{2} R \sin \theta d\phi^2 \right)^2. \quad (4.53)$$

Para manter a relação das tétradas  $\hat{\theta}^2 = e_a^\mu(x) dx^\mu$  é feita uma mudança para os tensores:

$$e_\mu^a(x) = \begin{pmatrix} V_f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R & 0 & 0 \\ 0 & 0 & nR \sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & \frac{n_\Omega}{2} R \sin \theta & 1 \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

$$e_a^\mu(x) = \begin{pmatrix} \frac{1}{V_f} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\alpha R \sin \theta} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{n_\Omega}{2\alpha} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

Em que, as componentes diferentes de zero são escritas como:

$$\omega_{\phi 2}^1(x) = -\omega_{\phi 1}^2(x) = -\alpha \cos \theta \quad (4.56)$$

$$\omega_{\phi 3}^1(x) = -\omega_{\phi 1}^3(x) = -\frac{n_{\Omega}}{2} \cos \theta \quad (4.57)$$

Desse modo segue-se algo parecido no que foi descrito no caso do grafeno. Tanto que pode se ver algo bastante parecido para o fulereno na equação de Dirac para férmions sem massa:

$$i \frac{\gamma^0}{V_f} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i \frac{\gamma^1}{R} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cot \theta}{2} \right) \psi + i \frac{\gamma^2}{\alpha R \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} - i \gamma^2 \frac{n_{\Omega}}{2\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial y} + i \gamma^3 \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{n_{\Omega}}{4\alpha R} \cot \theta \gamma^0 \gamma^5 \psi = 0 \quad (4.58)$$

E a fases geométricas é obtida mais uma vez como:

$$\Phi = \int \left( \frac{\alpha \cos \theta}{2} \Sigma^3 - \frac{n_{\Omega}}{4} \cos \theta \Sigma^2 \right) \quad (4.59)$$

$$\Phi = \pi \alpha \cos \theta \Sigma^3 - 3\pi(1 - \alpha) \cos \theta \Sigma^2 \quad (4.60)$$

Portanto, é mostrado que tanto para o grafeno e o seu derivado, o fulereno, é possível descrever uma fase quântica geométrica que também pode ser chamada de holonomia quântica para partículas na presença de defeitos topológicos.

## 5 CONCLUSÃO

A presença de defeitos topológicos vem sendo estudada há muitas décadas na física, tanto na área de matéria condensada quanto em outras áreas, como na física de altas energias. Esse problema está relacionado à quebra de simetria e, neste trabalho, mostramos como a presença de um defeito topológico no grafeno altera as propriedades do material. A existência de um defeito pode ser causada por diversos fatores, desde a sua formação natural até a criação artificial, dependendo da aplicação desejada.

Assim, mostramos que modelos análogos gravitacionais, como a teoria de Katanaev e Volovich para defeitos, e a de Kaluza-Klein, podem ser usados para descrever a obtenção de holonomias quânticas. Estas representam mudanças nas propriedades de um sistema quântico quando ele percorre um caminho fechado em um espaço de parâmetros. A partir disso, como vimos, pode-se definir uma fase geométrica para um caso geral. No caso particular de um sistema quântico que evolui lentamente, de forma adiabática, e retorna ao seu estado inicial após completar um ciclo fechado, define-se a fase de Berry, sendo um caso especial da fase geométrica. Dessa forma, tal fenômeno abre portas para aplicações como o desenvolvimento de portas lógicas na computação quântica, como discutido na referência (CAVALCANTE; FURTADO, 2021). Em uma perspectiva futura, essas abordagens podem ser aplicadas não apenas ao grafeno, mas também a outros nanomateriais, como o borofeno, um material 2D composto por átomos de boro, o que pode contribuir para uma compreensão mais aprofundada da física nesse contexto. Na pesquisa na qual cominou neste trabalho foi desenvolvida uma revisão sobre este nanomaterial, que, é de recente descoberta, considerando que o grafeno já está a mais de uma década estudado desde sua descoberta experimental (NARCISO; EMANUEL; CAVALCANTE, 2024).

Foi mostrado também que, ao utilizar a teoria de Kaluza-Klein, é possível demonstrar o aparecimento de efeitos análogos ao efeito Aharonov-Bohm. Além disso, foi evidenciado que também é possível observar algo semelhante à fase de Aharonov-Anandan, que é um caso mais geral, onde a evolução do sistema é cíclica. Essa evolução é acompanhada pela aparição dessas fases na função de onda quando há a presença de defeitos topológicos.

## 6 REFERÊNCIAS

AHARONOV, Y.; BOHM, D. **Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory.** Physical review, v. 115, p. 485, 1959.

TIWARI, A. et al. **Unhinging the surfaces of higher-order topological insulators and superconductors.** Physical review letters, v. 124, n. 4, p. 046801, 2020.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. **Solid State Physics.** [s.l.] Brooks/Cole, 2011.

BAKKE, K.; YU, P. A.; FURTADO, C. **A Kaluza–Klein description of geometric phases in graphene.** Annals of Physics, v. 327, p. 2946–2954, 2012.

BERRY, M. V. **Quantal phase factors accompanying adiabatic changes.** Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, v. 392, p. 45–57, 1984.

BOHM, A. et al. **The Geometric phase in quantum systems: foundations, mathematical concepts, and applications in molecular and condensed matter physics.** [s.l.] Springer Science Business Media, 2013.

ALVAREZ-QUICENO, Juan C. et al. **Oxidation of free-standing and supported borophene.** 2D Materials, v. 4, n. 2, p. 025025, 2017.

CAVALCANTE, E.; FURTADO, C. **Quantum holonomy based in a Kaluza–Klein description for defects in C 6 0 fullerenes.** International Journal of Geometric Methods in Modern Physics, v. 18, p. 2150163, 2021.

FURTADO, C.; BEZERRA, V.; MORAES, F. **Berry’s quantum phase in media with dislocations.** Europhysics Letters, v. 52, p. 1, 2000.

GONZALEZ, J.; GUINEA, F.; AH, V. M. **The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation.** Nuclear Physics B, v. 406, p. 771–794, 1993.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to quantum mechanics: International edition.** 2. ed. [s.l.] Pearson, 2005.

KALUZA, T. **Zum unitätsproblem der physik.** Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (Math. Phys.), v. 1921, p. 966–972, 1921.

KATANAEV, MIKHAIL O. **Geometric theory of defects.** Physics-Uspekhi, v. 48, p. 675, 2005.

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

KITTEL, C.; MCEUEN, P. **Introduction to solid state physics.** [s.l.] John Wiley Sons, 2018.

KLEIN, O. **Quantentheorie und fünfdimensionale relativitätstheorie.** Zeitschrift für Physik, v. 37, p. 895–906, 1926.

MELLO, DE; SANTOS, DOS. **Sobre o efeito aharonov-bohm.** Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 19, 1997.

NAKAHARA, M. **Geometry, topology and physics.** [s.l.] CRC press, 2018.

NARCISO, A.; EMANUEL, J.; CAVALCANTE, E. **Borofeno: Motivações, aplicações e comparativo com o grafeno.** Revista Física no Campus, v. 4, 2024.

KATANAEV, Mikhail O. **Geometric theory of defects.** Physics-Uspekhi, v. 48, n. 7, p. 675, 2005.

PENG, B. et al. **Stability and strength of atomically thin borophene from first principles calculations.** Materials research letters, v. 5, p. 399–407, 2017.

PIAZZA, Z. A. et al. **Planar hexagonal B36 as a potential basis for extended single-atom layer boron sheets.** Nature communications, v. 5, 2014.

WANG, Z. et al. **High anisotropy of fully hydrogenated borophene.** Physical chemistry chemical physics: PCCP, v. 18, p. 31424–31430, 2016.