



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

JOSÉ EMANUEL SILVA

GRAFENO: UM POSSÍVEL LABORATÓRIO PARA GRAVITAÇÃO E
COSMOLOGIA

CAMPINA GRANDE
2025

JOSÉ EMANUEL SILVA

**GRAFENO: UM POSSÍVEL LABORATÓRIO PARA GRAVITAÇÃO E
COSMOLOGIA**

Trabalho de Conclusão de
Curso (Artigo) apresentado á Coordenação
do Departamento do Curso de Licenciatura
Plena em Física da Universidade Estadual da
Paraíba como requisito parcial à obtenção do
título de Licenciado em Física.

Área de concentração: Física.

Orientador: Everton Cavalcante

**CAMPINA GRANDE
2025**

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.

S586g Silva, Jose Emanuel.

Grafeno [manuscrito] : um possível laboratório para gravitação e cosmologia / Jose Emanuel Silva. - 2025.
21 f. : il. color.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2025.

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

1. Grafeno. 2. Defeitos topológicos. 3. Estrutura cônica. I.
Título

21. ed. CDD 530.11

JOSÉ EMANUEL SILVA

GRAFENO: UM POSSÍVEL LABORATÓRIO PARA GRAVITAÇÃO E COSMOLOGIA

Trabalho de Conclusão de Curso (Artigo) apresentado à Coordenação do Departamento do Curso de Licenciatura Plena em Física da Universidade Estadual da Paraíba como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física.

Área de concentração: Física.

Aprovada em: 10/06/2025.

Banca Examinadora

Documento assinado eletronicamente por:

- **Ruth Brito de Figueiredo Melo** (***.934.704-**), em **25/06/2025 11:26:21** com chave **5d88432251d011f0916a06adb0a3afce**.
- **Everton Cavalcante** (***.699.765-**), em **20/06/2025 10:01:59** com chave **c08dd7004dd611f0b5481a1c3150b54b**.
- **Jean Paulo Spinelly da Silva** (***.685.684-**), em **20/06/2025 10:45:59** com chave **e5e983724ddc11f0b0b406adb0a3afce**.

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/ e informe os dados a seguir.

Tipo de Documento: Folha de Aprovação do Projeto Final

Data da Emissão: 25/06/2025

Código de Autenticação: aa7045



Dedico esse trabalho à minha Mãe,
Eriângela, por sempre acreditar em mim e
me apoiar nos momentos mais difíceis.

”Eu, um universo de átomos, um átomo no universo.” **Richard Feynman**

SUMÁRIO

1	Introdução	6
2	Grafeno	8
2.1	Estrutura de Favo de Mel	9
2.2	Propriedades Eletrônicas do Grafeno	12
3	Defeitos Topológicos	13
3.1	Processo de Volterra	14
3.2	Teoria Geométrica dos Defeitos	15
3.3	Defeitos Topológicos no Grafeno	15
3.3.1	Holonomia na Geometria Cônica	17
4	Conclusão	18
	Referências	19

GRAFENO: UM POSSÍVEL LABORATÓRIO PARA GRAVITAÇÃO E COSMOLOGIA

José Emanuel Silva¹

RESUMO

O grafeno é um alótropo do carbono que possui propriedades excelentes. Embora seja bidimensional, a sua estrutura cristalina é sempre coberta por ondulações e deformações que podem ser produzidas por uma rugosidade do substrato ou pela introdução de defeitos topológicos. Essas imperfeições presentes no material levam ao aparecimento de geometrias não triviais que podem ser descritas por uma abordagem que utiliza métricas do espaço-tempo para estudar as variações nas estruturas dos cristais, chamada de teoria geométrica dos sólidos. Neste trabalho, apresentaremos um estudo teórico sobre a influência de defeitos topológicos em sistemas bidimensionais de carbono, utilizando conceitos da relatividade geral adaptados à matéria condensada. E mostraremos que o grafeno com uma estrutura cônica pode ser útil para testar fenômenos gravitacionais e cosmológicos.

Palavras chave: Grafeno; Defeitos Topológicos; Estrutura Cônica.

ABSTRACT

Graphene is an allotrope of carbon that has excellent properties. Although it is two-dimensional, its crystalline structure is always covered by undulations and deformations that can be produced by a roughness of the substrate or by the introduction of topological defects. These imperfections present in the material lead to the appearance of non-trivial geometries that can be described by an approach that uses space-time metrics to study the variations in crystal structures, called the geometric theory of solids. In this work, we will present a theoretical study on the influence of topological defects in two-dimensional carbon systems, using concepts of general relativity adapted to condensed matter. And we will show that graphene with a conical structure, can be useful for testing gravitational and cosmological phenomena.

Keywords: Graphene; Topological Defects; Conical Structure.

1 Introdução

Há uma grande lacuna entre a Matéria Condensada e outras áreas de pesquisa, como, a Física da Alta Energia, a Teoria Quântica de Campos e a Cosmologia. Embora a especialização tenha possibilitado uma maior profundidade nos estudos, a falta de métodos

¹Graduando em Licenciatura em Física pela Universidade Estadual da Paraíba

que interligue o conhecimento é bastante preocupante. Sabemos que cientistas classificam fenômenos como sendo de certo ramo da Física, porém alguns recebem mais de uma classificação, podendo ser de várias áreas de pesquisa.

Um primeiro exemplo para citar neste trabalho é a teoria de Landau para a quebra espontânea de simetria. Que conecta, em certa medida, o mundo microscópico ao mundo macroscópico. Outros exemplos são a superfluidez do Hélio e a descoberta do grafeno. Onde, este último, fornece uma inesperada ponte entre a Matéria Condensada e a Física da Altas Energias (Vozmediano; Katsnelson; Guinea, 2010).

O grafeno foi o primeiro cristal bidimensional a ser sintetizado, isolado e demonstrado como estruturalmente estável. Durante muito tempo, acreditava-se que materiais puramente bidimensionais não poderiam existir de forma livre, devido à instabilidade termodinâmica prevista teoricamente. No entanto, em 2004, os físicos Andre Geim e Konstantin Novoselov conseguiram identificar e isolar o grafeno utilizando uma técnica simples de esfoliação mecânica com fita adesiva. A presença do grafeno foi revelada graças a um contraste óptico gerado sobre um substrato de dióxido de silício (SiO_2), permitindo sua visualização por meio de um microscópio óptico (Geim; Novoselov, 2007).

Composto apenas por átomos de carbono, o material tem seus elétrons confinados em duas dimensões, isso lhe confere propriedades excepcionais como, por exemplo, uma excelente robustez mecânica; altas condutividades elétrica e térmica; resistividade finita mesmo sem impurezas; e a outra característica bastante importante, é que seus elétrons se comportam como partículas relativísticas de massa zero. O que acarreta, dentre outras coisas, em um efeito Hall Quântico Anômalo (Bueno, 2011; Marino, 2017; Vozmediano; Katsnelson; Guinea, 2010).

A última propriedade faz o grafeno ter, em suas excitações de baixas energias, uma descrição semelhante as equações para o elétron na mecânica quântica relativística. Ou seja, os elétrons nesse material se comportam como férmions de Dirac sem massa nos chamados pontos de Dirac (Dartora; Jimenez; Zanella, 2015), fazendo uma relação profunda com a eletrodinâmica quântica e outras ideias da Teoria Quântica de Campos (Andrade, 2020; Bueno, 2011; Dartora; Jimenez; Zanella, 2015; Marino, 2017; Vozmediano; Katsnelson; Guinea, 2010).

Outro fenômeno para o grafeno foi sugerido em 2006, pelos físicos Katsnelson, Geim e Novoselov (Katsnelson; Novoselov; Geim, 2006) e verificado experimentalmente em 2009 por Young e Kim (Young; Kim, 2009). Denominado paradoxo de Klein, trata-se da capacidade de uma partícula quântica relativística de atravessar, com uma grande probabilidade, barreiras de potencial extremamente altas e largas. Por muito tempo, esse fenômeno foi discutido apenas em contextos teóricos extremos, como a criação de pares partícula-antipartícula na evaporação de buracos negros ou a quebra do vácuo durante colisões de núcleos superpesados (Bueno, 2011; Vozmediano; Katsnelson; Guinea, 2010).

Embora o grafeno seja bidimensional, já é comprovado tanto experimentalmente quanto teoricamente que o mesmo é sempre ondulado e coberto por deformações que podem ser produzidas por uma rugosidade do substrato ou pela introdução de defeitos topológicos, como, por exemplo, alguns pentágonos dentro da estrutura hexagonal (Bueno, 2011; Meyer *et al.*, 2007).

As imperfeições presentes na estrutura do grafeno levam ao aparecimento de geometrias não triviais. E, fazendo um análogo entre os defeitos topológicos e a teoria da relatividade, os físicos Katanaev e Volovich, em 1991, publicaram um modelo que descreve as variações nas estruturas dos sólidos por meio de métricas de espaço-tempo (Katanaev; Volovich,

1992). Ou seja, um modelo usando para a cosmologia, sendo utilizando para descrever cristais com curvaturas.

Por outro lado, também temos experimentos sendo propostos e realizados em sistemas da matéria condensada com o propósito de testar teorias cosmológicas. Por exemplo, foi estudado o comportamento dos níveis de Landau e o efeito Aharonov-Bohm de elétrons se movendo em um cristal contendo uma deslocação do tipo hélice; casos de curvas temporais fechadas foram propostas na vizinhança de vortices em Hélio superfluido; e foi verificado experimentalmente o mecanismo de Kibble, para a geração de defeitos topológicos, em cristais líquidos (Moraes, 2000).

Este trabalho tem o intuito de estudar algumas das características do grafeno, apresentando sua estrutura cristalina e suas propriedades eletrônicas. Mostrar que, partindo de defeitos topológicos, podemos modificar o cristal para diversas aplicações. E afirmar que a descrição da estrutura cônica na superfície do material, pode ser útil como um laboratório experimental para testar fenômenos análogos aos da Gravitação e da Cosmologia.

2 Grafeno

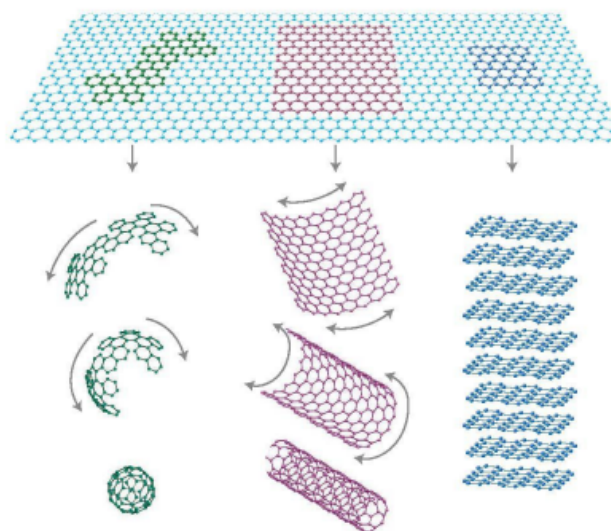
O grafeno tem se destacado entre os materiais bidimensionais, por ter uma estrutura cristalina típica que proporciona propriedades peculiares, como, por exemplo, uma ultra resistência mecânica, se comparado com uma folha do aço, o grafeno é 100 vezes mais forte; ser quase transparente, pois absorve apenas 2,3% da intensidade de luz; uma boa condutividade elétrica que é, em uma camada de grafeno, um pouco maior do que a condutividade do cobre; e uma excelente condutividade térmica do material, sendo 10 vezes melhor do que o cobre à temperatura ambiente (Bueno, 2011).

Esse material revolucionário apresenta um enorme potencial para aplicações tecnológicas, especialmente na indústria eletrônica. Sendo empregado para a fabricação de transistores, devido ao forte efeito de campo elétrico ambipolar. E ao otimizar sua estrutura e incorporar nanotubos de carbono ou fulerenos, pode ser útil para armazenamento de lítio e, com isso, melhorar as baterias de íons de lítio recarregáveis (Yang *et al.*, 2018).

Além disso, o grafeno pode ser considerado um ponto de partida para o estudo de outros alotropos do carbono, como, por exemplo, o grafite, os nanotubos e os fulerenos. Com forma bidimensional e arranjos hexagonais, o material pode gerar os demais a partir de defeitos topológicos (Figura 1). Por isso, mesmo antes de sua obtenção experimental, já havia numerosos estudos teóricos sobre suas propriedades notáveis, muitas das quais foram confirmadas experimentalmente desde então.

Essas propriedades extraordinárias são devido ao arranjo único e regular de seus átomos. E as aplicações citadas acima, são realizadas pela modificação da folha de grafeno com base na modulação de defeitos, durante o qual tipos específicos de disordens são quantitativamente criadas para alterar a estrutura cristalina do material e, por consequência, obter as propriedades desejadas (Yang *et al.*, 2018). Portanto, é necessário ter um bom entendimento da estrutura do cristal, para conseguir implantar defeitos topológicos eficientes.

Figura 1 – Formação das estruturas do fulereno, do nanotubo de carbono e do grafite, partindo do grafeno.

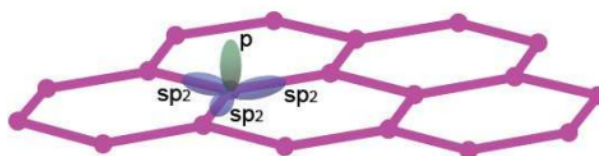


Fonte: Adaptado de Geim e Novoselov (2007, p. 2).

2.1 Estrutura de Favo de Mel

O grafeno é uma forma alotrópica do carbono, ou seja, o material é somente formado por átomos de carbono. E este elemento da tabela periódica possui uma configuração eletrônica de estado fundamental dada por $1s^2 2s^2 2p^2$. Essa configuração possibilita que as ligações químicas entre átomos de carbono sofram hibridização, onde os orbitais dos subníveis atômicos s e p se misturam, dando origem a orbitais híbridos sp , sp^2 e sp^3 . O grafeno possui um processo de hibridização do tipo sp^2 (Bueno, 2011), veja na Figura 2.

Figura 2 – Estrutura favo de mel e orbitais atômicos do carbono.



Fonte: Pachos (2008, p.2).

Nesse processo, ocorre que o orbital $2s$ se junta com os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ para produzir três ligações σ , representadas no plano xy em uma forma triangular. A ligação σ resultante tem um comprimento interatômico curto de $\sim 1,42\text{\AA}$, tornando-a ainda mais forte do que as ligações carbono-carbono hibridizados sp^3 em diamantes. É desta ligação, que concede ao grafeno a possibilidade de ter as excelentes propriedades mecânica citadas anteriormente (Yang *et al.*, 2018).

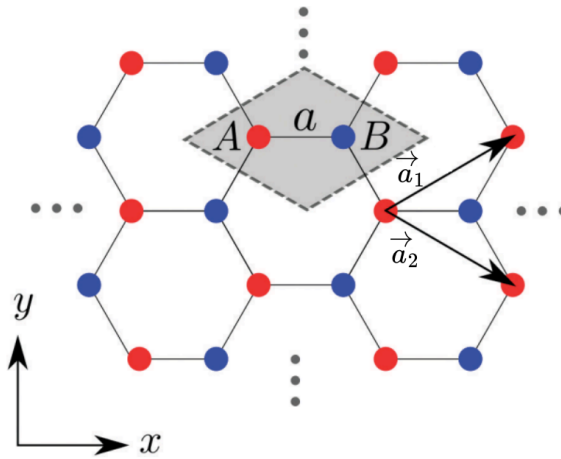
Entretanto, no orbital $2p_z$ temos a formação de uma ligação π perpendicular as outras ligações σ . A ligação π é responsável pelas propriedades eletrônicas, onde a formação da banda de condução e banda de valência com gap zero permite o movimento livre dos

elétrons. Além disso, as ligações π fornecem uma interação fraca de Van der Waals entre camadas adjacentes de grafeno (Bueno, 2011; Yang *et al.*, 2018).

A rede de favo de mel do grafeno é uma estrutura do tipo hexagonal e, mesmo tendo uma certa periodicidade, não forma uma rede de Bravais com um átomo na base. A rede de Bravais, é uma rede que possui dois vetores de translação primitivos que, linearmente combinados, podem gerar qualquer outro sítio da estrutura cristalina (Araújo *et al.*, 2022). No caso do grafeno, como essa condição não é satisfeita devido à presença de dois átomos distintos por célula unitária, a estrutura é descrita como sendo formada por duas sub-redes sobrepostas, denominadas sub-rede A e sub-rede B, ambas com periodicidade própria.

Os vetores de translação primitivos da rede cristalina podem ser definidos como $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ e a distância entre átomos de carbono, já mencionada anteriormente, é de $a = 0.142nm$. A estrutura cristalina contém dois átomos de carbono na base, um pertencente à sub-rede A e o outro pertencente à sub-rede B. E a célula unitária está destacada de cinza, como mostra a Figura 3.

Figura 3 – Subredes, vetores primitivos da rede cristalina e a célula unitária.



Fonte: Adaptada de Araújo *et al.* (2022, p.3).

A partir desta divisão, podemos estudar a estrutura do grafeno como sendo duas redes de Bravais triangulares sobrepostas. E assim, é possível escrever os vetores da rede cristalina como:

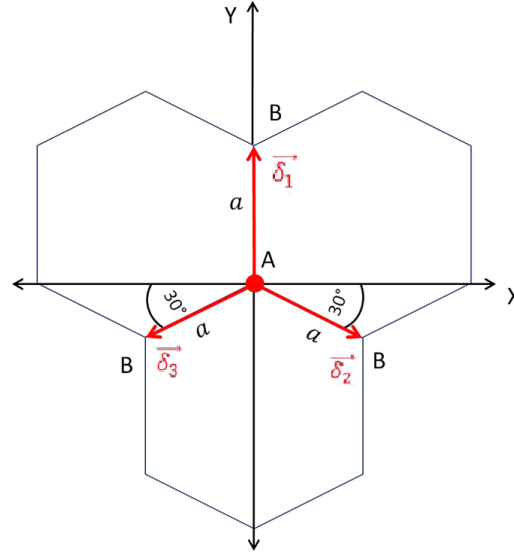
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \text{ e } \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}). \quad (1)$$

Possuindo conhecimento da rede cristalina no espaço real, podemos determinar os vetores relativos entre primeiros vizinhos e encontrar a rede recíproca. Observando a Figura 4, os vetores relativos $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$, que interligam os 3 primeiros vizinhos de um átomo de carbono da sub-rede A, são dados por:

$$\vec{\delta}_1 = a\hat{y}, \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}) \text{ e } \vec{\delta}_3 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}). \quad (2)$$

Para determinar os vetores correspondentes a um átomo da sub-rede B, basta considerar os vetores opostos de $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$, ou seja, $-\vec{\delta}_1$, $-\vec{\delta}_2$ e $-\vec{\delta}_3$. Isso se justifica pelo

Figura 4 – Vetores relativos a um átomo da sub-rede A, conectando aos três primeiros vizinhos da sub-rede B.



Fonte: Dartora, Jimenez e Zanella (2015, p.3301-4).

fato de que a sub-rede B é equivalente a uma rotação de 180° da sub-rede A (Dartora; Jimenez; Zanella, 2015).

A rede recíproca é uma rede construída no espaço dos vetores de onda $\vec{k}$ e é de bastante importância para descrição das bandas de energia dos materiais. Podemos determinar a rede recíproca do grafeno obtendo os vetores de translação primitivos $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$. Através das seguintes expressões, temos que:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \hat{z}}{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{2\pi}{3a}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad (3)$$

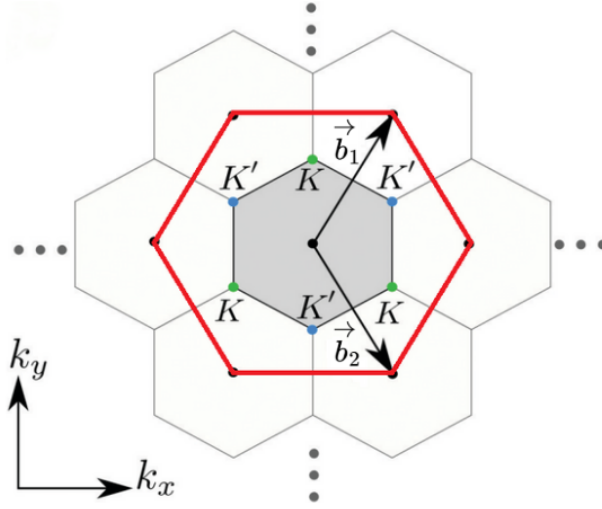
$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{z} \times \vec{a}_1}{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{2\pi}{3a}(\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}). \quad (4)$$

Sabendo que a rede recíproca é, também, uma rede de Bravais (Gomes, 2022). Podemos considerar um ponto de origem e, a partir dos vetores $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$, construir toda a rede recíproca realizando translações desse ponto na forma $\vec{K} = n\vec{b}_1 + m\vec{b}_2$, com n e m pertencentes aos números inteiros. A Figura 5 ilustra a rede recíproca, destacada de vermelho, obtida pelos vetores de translação.

A primeira zona de Brillouin, representada de cinza na Figura 5, corresponde à menor região fechada no espaço recíproco e é construída traçando retas entre um ponto de referência da rede recíproca e todos os demais. Em seguida, constroem-se retas perpendiculares nos pontos médios desses segmentos. A interseção dessas retas define os limites da primeira zona de Brillouin.

A partir dessa construção, é possível identificar dois pontos inequivalentes, dados por k e $k' = -k$, que não podem ser conectados por nenhum vetor da rede recíproca. Esses pontos são conhecidos como pontos de Dirac (Dartora; Jimenez; Zanella, 2015), e são fundamentais para a descrição das propriedades eletrônicas do grafeno.

Figura 5 – Rede recíproca gerada pelos vetores $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ destacada de vermelho e a primeira zona de Brillouin representada de cinza.



Fonte: Adaptada de Araújo *et al.* (2022, p.3).

2.2 Propriedades Eletrônicas do Grafeno

Uma vez compreendidos os aspectos geométricos da rede em favo de mel do grafeno, tanto no espaço real quanto no espaço recíproco, podemos avançar para a descrição da física dos elétrons nos orbitais p_z . Esses orbitais são os principais responsáveis pelas propriedades de transporte de carga do material, sendo adequadamente descritos por meio de um método de ligação forte simples (Dartora; Jimenez; Zanella, 2015).

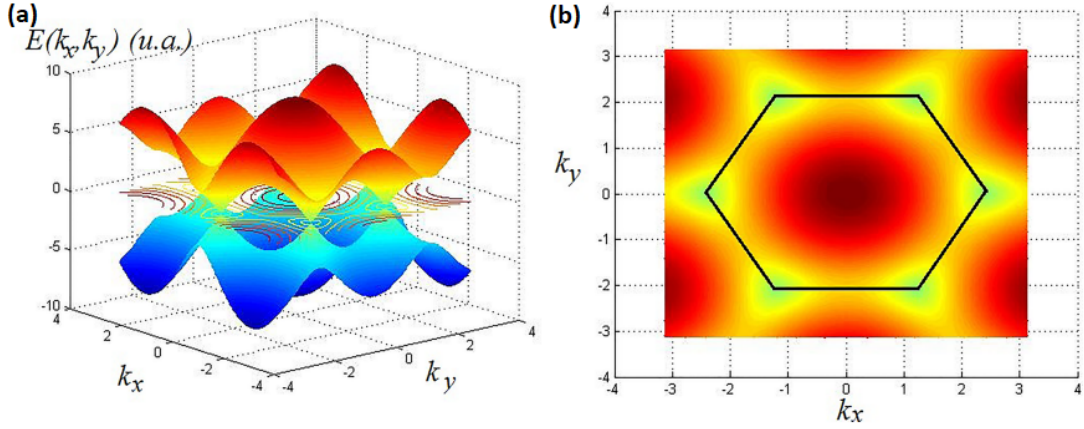
O método de ligação forte consiste em uma série de técnicas e aproximações que resultam em uma ferramenta poderosa para descrever a estrutura eletrônica de isolantes, bem como as bandas de energia de metais de transição (Gomes, 2022). Esse método parte do princípio da combinação linear de orbitais atômicos e considera a sobreposição das funções de onda entre átomos vizinhos. A partir disso, é possível calcular o espectro eletrônico de elétrons sujeitos a potenciais periódicos (Bueno, 2011).

No desenvolvimento do método de ligação forte, a hamiltoniana do cristal completo pode ser reduzida à hamiltoniana de um único íon, considerando as interações com os vizinhos mais próximos. O espectro de energia resultante para uma partícula apresenta duas superfícies — uma para $E > 0$ e outra para $E < 0$ — que se encontram nos pontos onde $E = 0$ (Bueno, 2011).

A distinção entre uma banda preenchida, parcialmente preenchida ou não preenchida é feita com base na energia de Fermi (ε_F). Quando ε_F é maior que a última energia de uma banda ($\varepsilon_F > \varepsilon_n(\vec{k})$), dizemos que a banda está completamente preenchida. Por outro lado, se $\varepsilon_F = \varepsilon_n(\vec{k})$, então a banda está parcialmente preenchida, ou seja, há estados disponíveis para os elétrons ocuparem (Gomes, 2022).

Observando a Figura 6(a), definimos a região de energia negativa (azul) como sendo a banda de valência e seus estados estão preenchidos. Já a região de energia positiva (vermelho), definida como a banda de condução, possui seus estados vazios. Dessa forma, a estrutura de bandas de energia do grafeno é semi-preenchida em $E = 0$, e o nível de Fermi coincide com os seis pontos isolados, onde dois deles são os pontos inequivalentes

Figura 6 – (a) Bandas de energia do grafeno em função de (k_x, k_y) ; (b) Mapa do contorno da banda de maior energia do grafeno na primeira zona de Brillouin.



Fonte: Dartora, Jimenez e Zanella (2015, p.3301-4).

k e k' (Bueno, 2011).

Sabemos que apenas elétrons na vizinhança da energia de Fermi é que são excitados por causa da estatística de Fermi-Dirac (Andrade, 2020). E em $E = 0$, as duas bandas do grafeno se tocam formando cones e esses pontos de contato ocorrem em seis posições situadas nos vértices da primeira zona de Brillouin, a qual possui formato hexagonal, observe a Figura 6(b). Nesses pontos, chamados de pontos de Dirac, os elétrons são descritos por uma matemática análoga à equação de Dirac para férmions sem massa em (1+2) dimensões e são “relativísticos” com velocidade de Fermi $v_F \approx c/300$ fazendo o papel da velocidade da luz (Dartora; Jimenez; Zanella, 2015).

Estas propriedades, possibilita uma grande quantidade de aplicações. E juntamente, com o estudo de defeitos topológicos no material, deformando-o com o intuito de utilizar para uma determinada função, amplia ainda mais as possibilidades de aplicar o grafeno na indústria eletrônica e, também, como um análogo laboratório experimental para testar e explorar fenômenos da Gravitação e da Cosmologia.

3 Defeitos Topológicos

Um cristal ideal é definido como aquele que consiste em um arranjo perfeitamente periódico de átomos idênticos, localizados nos pontos de uma rede cristalina, com essa periodicidade se estendendo ao infinito. Considerando tal configuração, podemos representar um cristal tridimensional ideal, perfeito e infinito, no qual nenhuma força externa atua sobre a estrutura. Esse sistema pode ser descrito como

$$\vec{x}_n = \vec{a}_1 n_1 + \vec{a}_2 n_2 + \vec{a}_3 n_3 \quad (5)$$

onde $\vec{a}_i$ são vetores da rede cristalina e n_i são números inteiros.

Sabemos que cristais produzidos em laboratório nunca são perfeitos, sempre encontramos defeitos, cuja origem pode ser química, elétrica ou de carácter estrutural, ou seja, o sólido pode ter em sua estrutura um excesso ou falta de elétrons ou simplesmente sua simetria foi quebrada em certa região (Bakke, 2009). Portanto, quando é aplicado

uma força sobre o cristal, este sofrerá deformações e as posições dos átomos na estrutura do material irão mudar do ponto $\vec{x}_n$ para

$$\vec{x}_n \rightarrow \vec{x}'_n = \vec{x}_n + \vec{u}_n(x). \quad (6)$$

Em que ao denotamos o campo vetorial deslocamento $u_n(x)$ e considerarmos o limite $\vec{a}_i \rightarrow 0$, podemos estudar o cristal no limite do contínuo. Com isso, a distância infinitesimal entre dois pontos no cristal, após uma deformação ou distorção da rede cristalina, vai ser:

$$dx'_i = dx_i + \partial_j u_i dx_j. \quad (7)$$

Portanto, podemos concluir que os defeitos topológicos estão associados a quebras de simetrias em materiais e meios, definindo a maior parte das propriedades físicas dos mesmos, como, por exemplo, plasticidade, fusão, crescimento, e etc (Bakke, 2009). Os defeitos podem ser classificados através do processo de Volterra e da teoria geométrica dos defeitos.

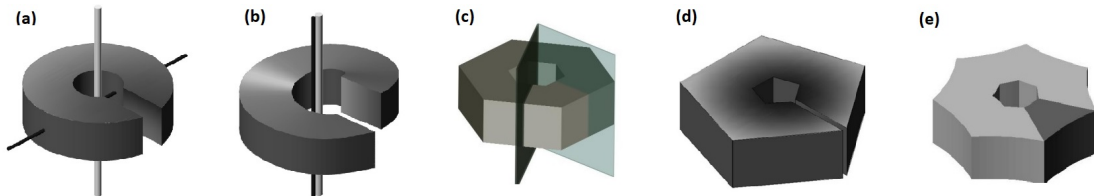
3.1 Processo de Volterra

A descrição de Volterra para a formação de defeitos topológicos em sólidos cristalinos, se define como um processo de “cortar e colar”. Dividindo-se os defeitos em três tipos: deslocamentos, desclinações e despirações (Bakke, 2009).

Os defeitos do tipo deslocamentos são associados à simetria de translação da rede cristalina, podendo ser uma deslocamento lateral (Figura 7(a)), onde houve uma translação perpendicular ao eixo de corte, ou uma deslocamento hélice (Figura 7(b)), onde a translação foi paralela ao eixo definido pela superfície de corte.

Outro tipo de defeito é a desclinação, onde temos uma relação com a simetria de rotação na rede cristalina. Olhando a Figura 7(c), vemos a parte do material em formato hexágono que será retirada ou inserida. Esse tipo de defeito pode ser classificado em uma desclinação positiva (Figura 7(d)), em que temos uma retirada de um setor do material e depois identifica-se os cortes. E em uma desclinação negativa (Figura 7(e)), onde corta-se o material, deslocando suas extremidades, e insere-se um determinado quantidade de material nesse espaço (Bakke, 2009).

Figura 7 – Tipos de defeitos topológicos no processo de Volterra: (a) Deslocamento lateral; (b) Deslocamento hélice; (c) Parte do material hexagonal; (d) Desclinação positiva e (e) Desclinação negativa.



Fonte: Adaptado de Bakke (2009, p.9).

E por fim, os defeitos do tipo despirações que são associados às simetrias de translação e rotação, seria basicamente, os outros dois tipos juntos. Nesse estudo somente iremos estudar a desclinação no grafeno.

3.2 Teoria Geométrica dos Defeitos

A Teoria da Relatividade Geral prevê que a gravitação surge como consequência da curvatura do espaço-tempo, a qual é caracterizada matematicamente pelo tensor de Riemann. E os defeitos topológicos no contexto gravitacional surge a partir da quebra espontânea de simetria, como por exemplo, o surgimento de cordas cósmicas (Vilenkin, 1981).

Em matéria condensada, os defeitos topológicos, como já mencionado anteriormente, também surgem da quebra de simetria. E a partir dessa relação, em 1991, os físicos Katanaev e Volovich, desenvolveram uma abordagem geométrica fundamentada na geometria de Riemann-Cartan para descrever as variações nas estruturas de sólidos por meio de métricas de espaço-tempo (Katanaev; Volovich, 1992).

Na formulação de Katanaev e Volovich, os defeitos topológicos são produzidos por dois tipos de fonte: os defeitos gerados pela curvatura do espaço-tempo tem como fonte o tensor energia-momento e são chamados de desclinações enquanto que os defeitos gerados pela presença de torção do espaço-tempo tem o momento angular de spin (clássico) como fonte e são chamados de deslocções (Bakke, 2009).

Com isso, Katanaev e Volovich estabeleceram quatro hipóteses para resolver a equação de Einstein e obter o tensor métrico (Bakke, 2009; Katanaev, 2005). São elas dadas pela Tabela 1 a seguir.

Tabela 1 – Classificação dos defeitos topológicos na teoria geométrica dos defeitos

Tipo de Defeitos	Tipos de Soluções	
Deslocações	$R_{\lambda\mu\nu}^\rho = 0$	$T_{\mu\nu}^\rho \neq 0$
Desclinações	$R_{\lambda\mu\nu}^\rho \neq 0$	$T_{\mu\nu}^\rho = 0$
Deformação elástica	$R_{\lambda\mu\nu}^\rho = 0$	$T_{\mu\nu}^\rho = 0$
Deslocações e desclinações	$R_{\lambda\mu\nu}^\rho \neq 0$	$T_{\mu\nu}^\rho \neq 0$

Fonte: Adaptado de Bakke (2009, p. 16).

Assim, sólidos cristalinos que apresentam defeitos topológicos podem, no limite contínuo, ser descritos pela teoria geométrica dos defeitos. Nesse contexto, esses materiais tornam-se potenciais laboratórios para a investigação de conceitos em Gravitação e Cosmologia (Moraes, 2000). Além disso, podem ser utilizados para modelar fenômenos dessas áreas, como fases geométricas em superfícies cônicas, o efeito Aharonov-Bohm e, ainda, apontam para possíveis aplicações tecnológicas futuras, como a computação quântica holonômica (Bueno, 2011).

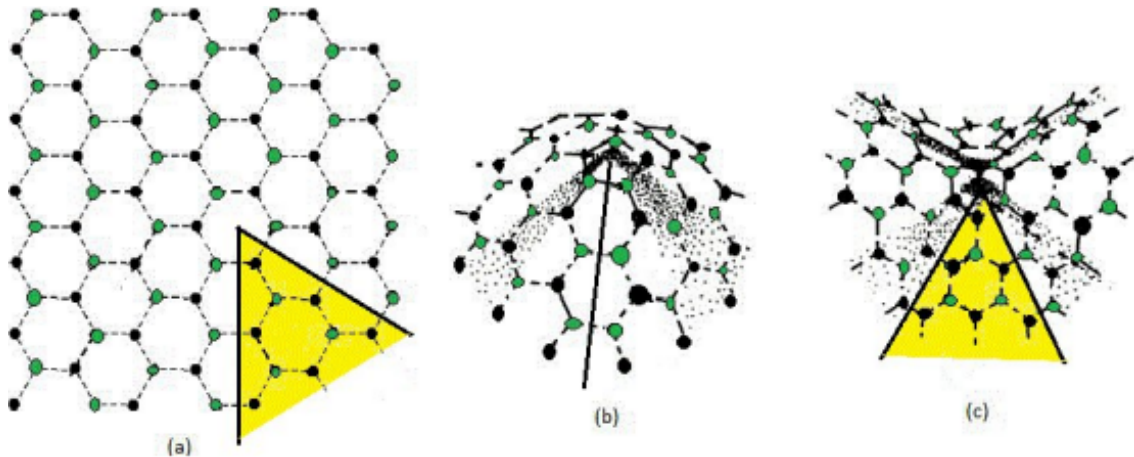
3.3 Defeitos Topológicos no Grafeno

Para entendermos os defeitos topológicos na rede do grafeno, onde se produz alguns dos alótropos do carbono, como por exemplo, o fulereno, o nanotubo de carbono e o grafite. Devemos entender como é aplicado, teoricamente, o processo de Volterra no material.

Partindo da folha planar de grafeno, se cortamos a estrutura em direção ao eixo vertical e adicionamos (ou removemos) um setor angular λ , podemos, depois de "colarmos" as

bordas do material, observar que o grafeno deixar de ser plano e forma uma deformação na estrutura do cristal. Veja a Figura 8.

Figura 8 – Representação do processo de Volterra: (a) Grafeno bidimensional, com um setor angular λ destacado de amarelo; (b) Desclinação positiva; (c) Desclinação negativa.

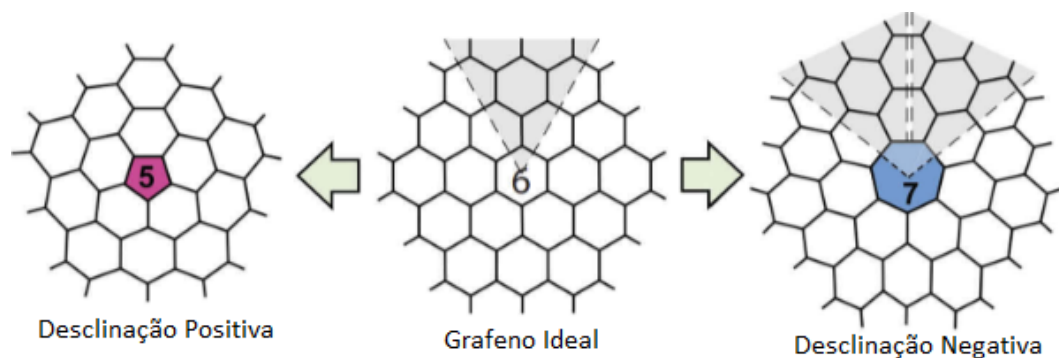


Fonte: Bueno (2011, p.22).

Observando a Figura 8(a), vemos uma folha de grafeno plana com uma área destacada em amarelo, representando um setor angular de abertura ($\lambda = \frac{\pi}{3}$), que poderá ser adicionado ou removido. Na Figura 8(b), a remoção desse setor angular resulta em uma desclinação positiva na estrutura do material, formando, assim, um tipo de nanocôno de carbono. Por outro lado, a Figura 8(c) ilustra uma desclinação negativa, ocasionada pela inserção do setor angular (Bueno, 2011).

Após esse processo, é identificado um novo formato no grafeno, que agora não possui somente hexágonos na estrutura, é observado um pentágono para a desclinação positiva e um heptágono para a desclinação negativa, veja Figura 9.

Figura 9 – Estrutura do grafeno com desclinação positiva e negativa.



Fonte: Yang *et al.* (2018, p.627).

Nas estruturas cônicas formadas em folhas de grafeno com desclinações, os defeitos atuam como fontes de um campo de distorção geométrica, alterando significativamente a estrutura eletrônica em baixas energias. As perturbações introduzidas pelos defeitos no

meio elástico contínuo do grafeno podem ser descritas de forma eficaz por meio da teoria geométrica de defeitos em sólidos (Bueno, 2011).

Nessa abordagem de Katanaev e Volovick, podemos descrever desclinações no grafeno e nanocônes de carbono utilizando uma métrica que contém todas as informações topológicas do meio que circunda o defeito. Essa métrica é uma solução da equação tridimensional de Einstein-Cartan. E utilizando essa teoria, podemos mostrar que o efeito geométrico Aharonov-Bohm aparece naturalmente neste sistema, devido às suas propriedades topológicas e geométricas (Furtado; Moraes; Carvalho, 2008).

Sabendo disso, as estruturas cônicas na folha do grafeno serão descritas em uma aproximação contínua pela métrica bidimensional:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\phi^2, \quad (8)$$

onde α é um parâmetro que identifica a presença do defeito e está relacionado com o setor angular λ , que é removido ou inserido para formar o defeito pela expressão $\alpha = 1 + \frac{\lambda}{2\pi}$.

No grafeno, devido a sua simetria hexagonal, o setor angular λ pode ser quantizado como $\lambda = \pm N \frac{\pi}{3}$, onde $0 < N < 6$ representa o número de setores angulares inseridos (sinal positivo) ou removidos (sinal negativo). Substituindo essa expressão na equação de α , obtemos:

$$\alpha = 1 \pm \frac{N}{6}. \quad (9)$$

Os valores de α no intervalo $0 < \alpha < 1$ correspondem a espaços com curvatura positiva, resultantes da remoção de um ou mais setores angulares do material. Por outro lado, quando $\alpha > 1$, temos espaços com curvatura negativa, associados à inserção de setores angulares. O grafeno ideal está associado a $N = 0$, onde $\alpha = 1$ e temos a ausência de disclinação.

Com a introdução de curvatura na folha de grafeno, a rede hexagonal sofre uma distorção geométrica que pode ser quantificada pela circulação de um vetor tangente ao longo de um caminho fechado em torno do topo da estrutura cônica formada pelo defeito. Observa-se que, ao realizar o transporte paralelo de um spinor ao redor desse defeito, ele adquire uma fase não trivial. Essa mudança de fase é conhecida como holonomia (Bueno, 2011).

3.3.1 Holonomia na Geometria Cônica

Considerando uma geometria cônica bidimensional que descreve uma disclinação no grafeno, podemos, de acordo com (Furtado; Moraes; Carvalho, 2008), empregar transporte paralelo para investigar a fase geométrica da função de onda eletrônica, utilizando o modelo de Lammert-Crespi, na geometria dada pela equação (8).

Ao estudar as propriedades globais da geometria de um nanocône de carbono, calcula-se a matriz de estrutura ortonormal para o transporte paralelo de um spinor ao longo de um caminho fechado, obtendo a matriz holonomia. Com isso, podemos definir a holonomia por:

$$U(C) = \mathbf{P} \exp \left(- \oint \Gamma_\mu(x) dx^\mu \right), \quad (10)$$

onde $\mathbf{P}$ representa o produto ordenado e $\Gamma_\mu(x)$ é a conexão spinorial.

No modelo de Lammert-Crespi, as propriedades eletrônicas do grafeno são obtidas a partir de um hamiltoniano de Dirac para férmions sem massa em dimensões (2+1) (Lammert; Crespi, 2000). E ao investiga-se o transporte paralelo de spinores em um espaço cônico afim de obter propriedades globais do modelo, se obtém as conexões spinoriais para cones através de

$$\Gamma_\mu(x) = -i \frac{(\alpha - 1)}{2} \sigma^3, \quad (11)$$

onde σ^3 é uma das matrizes de Pauli.

Assim, a matrix holonomia, $U(C)$, que representa o transporte paralelo de um spinor ao longo de um caminho C ao redor do cone, é dado por

$$U(C) = \exp \left[\frac{-i}{2} (\alpha - 1) \sigma^3 \phi \right]_0^{2\pi}, \quad (12)$$

e pode ser expandida como

$$U(C) = \cos [(\alpha - 1)\pi] + i\sigma^3 \sin [(\alpha - 1)\pi]. \quad (13)$$

A curvatura introduzida na estrutura do grafeno pela remoção ou inserção de um setor angular não é a única consequência relevante. Em uma rede hexagonal plana, ao se percorrer um caminho fechado ao redor de um defeito, os spinores naturalmente alternam entre as sub-redes A e B. No entanto, quando se insere uma desclinação, ocorre uma alteração nas ligações da rede, de forma que dois átomos da mesma sub-rede passam a ser conectados. Isso força os spinores a saltarem entre sítios da mesma sub-rede. Essa descontinuidade provoca uma mistura dos estados associados às sub-redes A e B, resultando em um efeito de fase que é análogo ao efeito Aharonov-Bohm (Bueno, 2011).

Outros análogos podem ser estudados partindo dessas teorias. Trabalhos recentes mostram o surgimento de fenômenos semelhantes à gravidade no grafeno. Mais precisamente, o efeito Hawking que pode ocorrer em membranas de grafeno no formato de pseudoesferas de Beltrami com tamanho adequadamente grande, portanto, até cenários de buracos negros (2+1) dimensionais podem ser estudados (Iorio, 2015).

4 Conclusão

A análise teórica desenvolvida ao longo deste trabalho permitiu demonstrar que o grafeno, devido à sua estrutura bidimensional e propriedades eletrônicas singulares, constitui um sistema físico altamente promissor para a investigação de fenômenos análogos aos da gravitação e da cosmologia. A introdução controlada de defeitos topológicos, como as desclinações, induz curvaturas não triviais em sua rede cristalina, possibilitando a aplicação de conceitos oriundos da geometria do espaço-tempo, especialmente por meio da teoria geométrica dos defeitos. Verificou-se que estruturas cônicas no grafeno podem ser descritas por métricas análogas às da Relatividade Geral, permitindo, inclusive, o surgimento de efeitos como a holonomia de spinores e fases geométricas similares ao efeito Aharonov-Bohm. Além disso, a literatura recente sugere a possibilidade de simular cenários associados a buracos negros e ao efeito Hawking neste material. Concluímos assim que o grafeno representa não apenas uma plataforma para aplicações tecnológicas avançadas, mas também um laboratório experimental viável para o teste e a exploração de

ideias fundamentais da física teórica. A abordagem interdisciplinar adotada neste estudo reforça a relevância do grafeno como elo entre a matéria condensada e os campos da gravitação e da cosmologia.

REFERÊNCIAS

ANDRADE, E. C. **Modelos tight-binding e grafeno**. Universidade de São Paulo, 2020.

ARAÚJO, F. R. V.; MAGALHÃES, R. N. S.; de SOUSA Jr., I. V.; NASCIMENTO, A. C. S.; COSTA, D. R. da **Análogos eletrônicos de dispositivos ópticos em grafeno: da junção , p-n à lente de Veselago**. Revista Brasileira De Ensino De Física, v. 44, e20220132, 2022.

BAKKE, K. **Fases Geométricas, Quantização de Landau e Computação Quântica Holonômica para Partículas Neutras na Presença de Defeitos Topológicos**. Tese de Doutorado. Universidade Federal da Paraíba, 2009.

BUENO, M. J. **Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos**. Tese de doutorado UFPB, 2011.

DARTORA, C.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. **Os fundamentos da física dos férmions de dirac sem massa em (1+ 2)-d e o grafeno**. Revista Brasileira de Ensino de Física, SciELO Brasil, v. 37, p. 3301, 2015.

FURTADO, C.; MORAES, F.; CARVALHO, A.M. de M. **Geometric phases in graphitic cones**. Physics Letters A, v. 372, n. 32, p. 5368-5371, 2008.

GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. **The rise of graphene**. Nat. Mater., v. 6, p.183-191. 2007.

GOMES, L. H. **Introdução à Física do Grafeno**. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade do Estado do Pará. Belém, 2022.

IORIO, A. **Graphene and black holes: novel materials to reach the unreachable**. Frontiers in Materials, v. 1, p. 36, 2015.

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.

KATANAEV, M. O. **Introduction to the Geometric Theory of Defects**. Physics-Uspekhi, v. 48, n. 7, p. 675, 2005. <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0502123>

KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. **Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene**. Nature physics, v. 2, n. 9, p. 620-625, 2006.

LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. **Topological phases in graphitic cones**. Physical review letters, v. 85, n. 24, p. 5190, 2000.

MARINO, E. C. **Quantum Field Theory Approach to Condensed Matter Physics**. Cambridge University Press, p. 437-457. 2017.

MEYER, J. C. GEIM, A. K., KATSNELSON, M. I., NOVOSELOV, K. S., BOOTH, T. J., ROTH, S. **The structure of suspended graphene sheets**. Nature, v. 446, n. 7131, p. 60-63, 2007.

MORAES, F. **Condensed Matter Physics as a Laboratory for Gravitation and Cosmology**. Brazilian Journal of Physics, v.30, p. 304-308, 2000.

PACHOS, J. K. **Manifestations of topological effects in graphene**. Contemporary Physics, p. 1-20, 2008.

VILENKIN, A. **Gravitational field of vacuum domain walls and strings**. Physical Review D, College Park, MD, v.23, n.4, p.852-857, 1981.

VOZMEDIANO M. A. H.; KATSNELSON M. I.; GUINEA F. **Gauge fields in graphene**. Physics Reports, v. 496, n. 4-5, p. 109-148, 2010.

YANG, G.; LI, L.; LEE, W. B.; NG, M. C. **Structure of graphene and its disorders: a review**. Science and Technology of advanced materials, v. 19, n. 1, p. 613-648, 2018.

YOUNG, A. F.; KIM, P. **Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions**. Nature Physics, v. 5, n. 3, p. 222-226, 2009.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, pela minha vida e por permitir conhecer um pouco sobre esse vasto Universo em que vivemos.

Agradeço à minha mãe, Eriângela Aderi, e à meu pai, José Edilson, por todo o apoio e incentivo para com a minha educação. Aos meus irmãos, que sempre estiveram ao meu lado, pela amizade incondicional e pelo apoio demonstrado ao longo de toda a minha vida.

Agradeço à minha avó, por ser um exemplo de professora e uma inspiração para a escolha dessa profissão. Ao meu tio e tias, que desde criança me aconselham a se dedicar aos estudos.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Everton Cavalcante, pelo incentivo constante e pelas sugestões enriquecedoras que moldaram não apenas este trabalho, mas também minha visão como estudante e pesquisador.

Aos professores do departamento de Física, em especial, Alessandro Frederico, Alex da Silva, Ana Paula, Ana Roberta, Bugley Ramos, Eugênio Bastos, Jean Spinelly, José Antônio, Marcelo Germano, Tamara Ribeiro e Ruth Brito, que com suas aulas e métodos

de ensino, deixaram grandes aprendizados que levarei sempre comigo. Cada professor, durante a graduação tiveram um papel muito importante para a minha formação.

Aos professores da Educação Básica, por todos os conselhos, pela ajuda e pela paciência com a qual guiaram o meu aprendizado.

Agradeço aos meus colegas de curso, Aniely Lopes, Eduardo Henrique, Jonathan Kevelly, José Anderson, José Augusto, Lucas José, Luciano Antunes, Mariana Luciana, Samuel Venâncio, Yan Barbosa e vários outros, que tornaram esta jornada mais leve e agradável com suas amizades. Sou grato por cada momento compartilhado, pelas boas conversas e pela troca de conhecimentos.

Agradeço a Universidade Estadual da Paraíba e ao CNPq, pela disponibilização de bolsas para Iniciação Científica, a qual tive a oportunidade de participar. Foi uma das experiências que mais contribuiu para minha formação e para a construção desse trabalho.

E por último, agradeço à todos que diretamente ou indiretamente ajudaram com a elaboração desse trabalho. Muito obrigado!