

DENSIDADE DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS NA TEORIA GEOMÉTRICA

Elenilson Santos Nery¹; Carlos Alberto de Lima Ribeiro²

1. Bolsista PROBIC/UEFS, Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: elenilsonnery@hotmail.com
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: calr@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Defeitos topológicos, Densidade de Defeitos, Níveis de Landau.

INTRODUÇÃO

O sucesso da *Teoria da Relatividade Geral* (RG) com suas estruturas geométricas, ou melhor, a geometria *Reimanniana*, fez com que outros campos da Física ao longo dos anos utilizassem essa mesma ferramenta, um deles foi o da *Matéria Condensada* (MC), com isto alguns modelos da MC ganharam um papel experimental, como laboratório da gravitação e cosmologia para alguns fenômenos (Moraes, 2000).

Uma das áreas da MC que fez uso das ferramentas utilizadas na RG foi àquela que estuda as características de meios elásticos com defeitos topológicos, ou mais especificadamente a *Teoria Geométrica de Defeitos* (TGD). Um defeito topológico é em geral caracterizado por alguma região central onde a ordem é destruída, através de uma quebra de simetria (Chaikin, 1995). Eles podem ser lineares, quando se estende ao longo de uma linha, pontuais, quando a imperfeição se localiza em torno de um ponto da estrutura. Aqui vamos tratar apenas os lineares. Diversas teorias descrevem meios elásticos contendo defeitos, uma das mais representativas é a *Teoria da Elasticidade* (TE), porém vamos utilizar apenas o corpo teórico da TGD. Esta última descreve o sólido elástico com alguns parâmetros utilizados na geometria de *Riemann-Cartan*, nesse formalismo o stress e o strain são vistos através de informações contidas nas métricas.

Inicialmente as abordagens do uso da TGD produziam resultados qualitativos (Moraes, 2000). Mas atualmente alguns pesquisadores já trabalham com a concepção da presença de defeitos topológicos em sistemas físicos reais, como no caso do grafeno.

Neste trabalho vamos aplicar a estrutura da TGD para avaliar a dinâmica quântica de partículas em meios elásticos com uma densidade uniforme de defeitos topológicos, de maneira particular as deslocções parafuso (defeito topológico linear associado à quebra de simetria de translação). Primeiro encontraremos as autofunções e autovalores (energia) de uma partícula livre e em seguida vamos novamente encontrar essas grandezas, mas para uma partícula carregada submetida a um campo magnético externo.

METODOLOGIA

O primeiro passo foi o estudo da teoria de defeitos ou mais precisamente a Teoria Geométrica de Defeitos Topológicos, onde avaliamos as diversas aplicações e seus respectivos resultados. Um estudo detalhado da *Mecânica Quântica* (MQ) foi desenvolvido, assim alguns exemplos típicos de um curso introdutório a quântica foram resolvidos e diversas bibliografias consultadas. Houve também a necessidade de um conhecimento de algumas funções matemáticas, por agregarem algumas propriedades de interesse na Física e nos problemas em estudo. Por fim estudamos a dinâmica quântica de partículas em um meio contendo uma densidade uniforme de defeitos topológicos, na presença, ou não, de campo magnético externo. E assim confrontamos os resultados com diversos outros encontrados em artigos da área de TGD e verificamos as implicações dos defeitos nas mudanças das propriedades da partícula.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Utilizamos as idéias desenvolvidas por Volterra, processo de "corte e cole", na construção dos defeitos topológicos lineares. Ele modelou seus defeitos através da construção de um cilindro oco reto, orientado na direção da coordenada z , feito de material elástico. O processo consiste em um corte num plano $\theta = 0$ no material, em seguida, translada ou rotaciona os planos, separados pelo corte, nas direções x , y ou z . Isso corresponde a um deslocamento relativo de um vetor \vec{b} (**Vetor de Burgers**: informação geométrica) ao longo dessas direções.

De acordo com as estruturas propostas por Volterra, os mesmos podem ser estudados levando em consideração um tensor métrico que respeite os aspectos da simetria cilíndrica e com mesmo rigor o defeito associado. Proposta de Katanaev & Volovich. Assim esta métrica carrega a informação do defeito (Vetor de Burgers ou ângulo de Frank). Abaixo temos dois exemplos desta estrutura: uma deslocação (fig. 1) e uma desclinação (fig. 2) com suas respectivas métricas.

Deslocação Parafuso: vetor de Burgers paralelo a linha de deslocação. Sua métrica é do tipo

$$ds^2 = \left(dz + \frac{b}{2\pi} d\theta \right)^2 + dr^2 + r^2 d\theta^2 \quad (1)$$

Onde b é o módulo do vetor de Burgers.

As **desclinações** podem ser de dois tipos: positivas ou negativas. As positivas são aquelas nas quais foram retiradas porções do material (sólido) nos processos de formação. Enquanto que a negativa acontece o contrário, adicionamos, após o corte, mais material ao sólido. Neste caso a métrica é da forma:

$$ds^2 = dz^2 + dr^2 + \alpha^2 r^2 d\theta^2 \quad (2)$$

onde α está associado ao déficit angular.

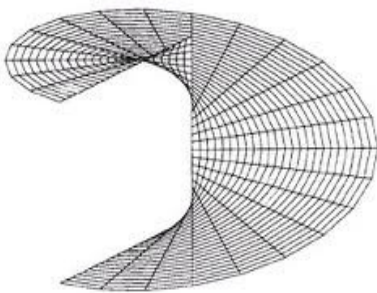


Figura 1: Deslocação parafuso (translação ao longo do eixo z) (Moraes, 2000).

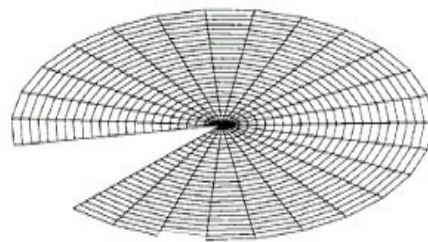


Figura 2: Uma desclinação, (Moraes, 2000).

No entanto esse trabalho se estruturou em um meio elástico com uma densidade uniforme de deslocações parafuso que neste caso a métrica (2) se estende a uma forma mais geral que fica,

$$ds^2 = (dz + \Omega r^2 d\theta)^2 + dr^2 + r^2 d\theta^2 \quad (3)$$

Com $\Omega = \frac{b\sigma}{2}$, onde σ representa o número de deslocações por unidade de área. Então os tensores métricos de interesse na TGD ficam:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & \Omega r^2 & 0 \\ \Omega r^2 & r^2(1 + \Omega^2 r^2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad g^{ij} = \begin{bmatrix} (1 + \Omega^2 r^2) & -\Omega & 0 \\ -\Omega & 1/r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Assim para estudar a dinâmica quântica em um meio que contenha defeitos devemos utilizar na solução da equação de Schrödinger com do operador Laplace-Beltrame, pois este incorpora as informações do espaço via as métricas,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m\sqrt{g}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k} - \frac{e}{c} A_k \right) \sqrt{g} g^{kj} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j} - \frac{e}{c} A_j \right) \quad (6)$$

Onde m é a massa da partícula, e é a carga do elétron, c é a velocidade da luz, g é o determinante do tensor métrico covariante, g^{kj} é o tensor métrico contravariante e A_j são as componentes do potencial vetor.

Para o caso de uma partícula livre, na presença de uma distribuição homogênea de deslocação parafuso, com a métrica (3), a equação de Schrödinger independente do tempo tem a forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - r\Omega \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r, \theta, z) = E \psi(r, \theta, z) \quad (7)$$

Sendo E os autovalores (energia). A solução da equação diferencial (7) pode ser tomada como a função abaixo,

$$\psi(r, \theta, z) = R(r) e^{il\theta} e^{ikz} \quad (8)$$

Que com algumas simplificações, estudo dos limites assintóticos, e mudanças de variáveis chegamos a expressão,

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (1 + |l| - x) \frac{dy}{dx} + \left(\gamma - \frac{|l| + 1}{2} \right) y = 0 \quad (9)$$

Onde $x = k\Omega r^2$ e $\gamma = \frac{1}{4k\Omega} \left(2lk\Omega - k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$. Sendo a equação (9) é conhecida equação diferencial hipergeométrica confluyente, cuja solução é a série do tipo,

$$y(x) = \frac{\Gamma(|l| + 1)}{\Gamma\left(\frac{|l| + 1}{2} - \gamma\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n + \frac{|l| + 1}{2} - \gamma\right) x^n}{\Gamma(n + |l| + 1) n!} \quad (10)$$

Mas essa série não é adequada para ser solução da função de onda (8) devido a divergência quando $x \rightarrow \infty$, para que a mesma seja suficientemente adequada devemos fazer,

$$\frac{|l| + 1}{2} - \gamma = -n \quad (11)$$

Onde $n = 0, 1, 2, \dots$ é um inteiro. Daqui

$$E = \hbar\omega_{el} \left(n + \frac{|l|}{2} + \frac{l}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (12)$$

Onde $\omega_{el} = \frac{2\hbar k\Omega}{m}$. Note que a primeira parte do lado direito de (12) depende explicitamente do defeito associado, e este desempenha um papel de potencial. Quando $\Omega \rightarrow 0$ tem-se um valor para a energia conhecida $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ espectro contínuo de energia, caso de uma partícula livre em um meio sem defeitos.

Agora vamos considerar uma situação mais geral, colocando um campo magnético uniforme externo na direção z , ($\vec{B} = B\hat{e}_z$). Para essa situação escolhemos um potencial vetor do tipo,

$$A_\theta = \frac{Br}{2} \quad (13)$$

A partir do Hamiltoniano (6), a equação de Schrödinger independente do tempo, fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - r\Omega \frac{\partial}{\partial z} - \frac{ieB}{2\hbar c} r \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(r, \theta, z) = E\psi(r, \theta, z) \quad (14)$$

Usando a solução (8), e as devidas mudanças de variáveis necessárias, encontramos a seguinte equação diferencial,

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (1 + |l| - x) \frac{dy}{dx} + \left(\delta - \frac{|l| + 1}{2} \right) y = 0 \quad (15)$$

na qual, $x = k\Omega r^2$, $\delta = \frac{1}{4K\Omega} \left(2lk\Omega - k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right)$ e $K = \left(l + \frac{eB}{2\hbar c\Omega} \right)$. Como foi dito acima a solução da equação (15) é a série (10) que para satisfazer as condições do problema físico devemos tomar,

$$\frac{|l| + 1}{2} - \delta = -n \quad (16)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$ e essa expressão (16) conduz as autovalores (energia) a ser determinados de maneira a obedecer a relação,

$$E = \hbar(\omega_{el} + \omega_B) \left(n + \frac{|l|}{2} + \frac{l}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (17)$$

Onde $\omega_{el} = \frac{2\hbar k\Omega}{m}$ e $\omega_B = \frac{eB}{m}$. Podemos perceber que a energia ganha um termo aditivo ao encontrado antes na equação (17). Se fizermos $B = 0$ temos o resultado (12). Por outro lado se $\Omega \rightarrow 0$ temos os conhecidos na literatura como níveis de Landau.

CONCLUSÕES

Os estudos realizados da dinâmica quântica em meios contendo uma densidade uniforme de defeitos topológicos demonstraram resultados interessantes, a expressão (12) carrega uma informação importante por sua similaridade com os níveis de Landau, para termos esses devemos fazer $\omega_{el} \rightarrow 0$ em (17). Isto se deve, pois a quantização de Landau é diretamente responsável por oscilações nas propriedades eletrônicas de materiais como uma função do campo magnético aplicado. No caso da região com defeitos essas propriedades serão assim medidas pelos parâmetros relacionados com as imperfeições (vetor de burgers ou/e ângulo de Frank).

BIBLIOGRAFIA

- MORAES, F. 2000. "Condensed Matter Physics as a Laboratory for Gravitation and Cosmology". Brazilian J. of Phys., v. **30**, n. 2, 304-308.
- SILVA NETTO, A. L.; FURTADO, C. 2008. "Elastic Landau levels". J. Phys.: Condens. Matter v. **20**, 125209.
- KATANAIEV, M.O.; VOLOVICH, I.V. 1992. "Theory of defects in solids and three-dimensional gravity". Ann. Phys. (New York), v. **216**, 1-28.
- CHAIKIN, Paul M; LUBENSKY, T. C. 1995. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- GRIFFITHS, D. J. 2011. *Mecânica Quântica*. 2. ed.. São Paulo: Pearson Prentice Hall.