Twistons Topológicos no Polietileno Cristalino

Damares S. S. Borges

Itapetinga - BA, Brasil

16 de Agosto de 2019

Sumário

- Introdução
- Teoria de Campos Escalares para Configurações Unidimensionais
- *Twistons* no Polietileno Cristalino
- Considerações Finais
- Referências

Introdução

- **Sólitons ou ondas solitárias** (J. Scott Russel - 1834): configurações de campo com energia finita que preservam sua forma e velocidade.

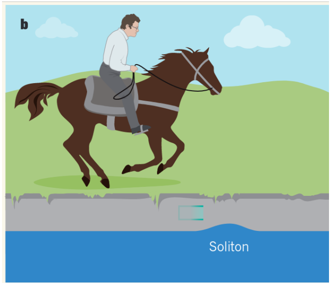

Figure: Ref: Flindt, Christian. Nature Vol. 502, pages 630-632 (Oct 2013)

INTRODUÇÃO

Kinks

Tipos mais simples de sólitons em uma dimensão espacial.

- São caracterizados por uma carga topológica conservada.
- Apresentam limites assintóticos diferentes e conectam mínimos ou vácuos de um potencial.

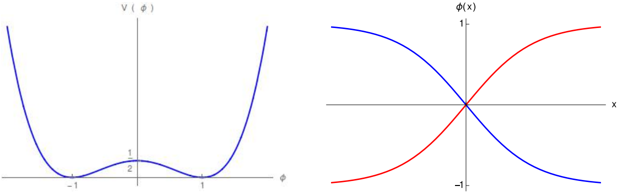

FIGURE: Esq.: Potencial ϕ^4. Dir.: Soluções: *kink* e anti-*kink*.

Introdução

Twistons em Cristais de Polietileno - Mansfield e Boyd (1978)

Torções suaves de 180° que se prolongam em vários grupos de CH_2 no plano ortogonal à direção da cadeia.

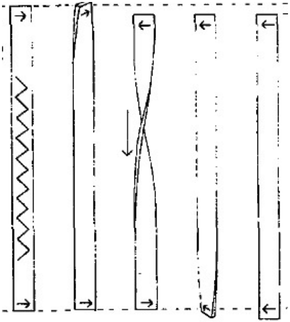

Figure: Ref: Mansfield and Boyd. Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition, Vol. 16, 1227-1252 (1978)

Teoria de Campos Escalares para Configurações Unidimensionais

Convenções: $g^{\mu\nu} = diag(+,-,-,-)$ e sistema de unidades naturais $c = \hbar = 1$.

A teoria para um modelo de dois campos escalares reais $\phi = \phi(x,t)$ e $\chi = \chi(x,t)$ pode ser descrita pela seguinte densidade de lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi + \frac{1}{2}\partial_\mu\chi\partial^\mu\chi - V(\phi,\chi), \tag{1}$$

onde $V(\phi,\chi)$ é o potencial que especificará o modelo de dois campos a ser estudado.

As equações de movimento dessa configuração são dadas por

$$\ddot{\phi} - \phi'' + V_\phi = 0 \qquad \text{e} \qquad \ddot{\chi} - \chi'' + V_\chi = 0. \tag{2}$$

Soluções Estáticas

No regime estático, considerando $\phi = \phi(x)$ e $\chi = \chi(x)$, as equações de movimento são dadas por

$$\phi'' = V_\phi \qquad \text{e} \qquad \chi'' = V_\chi. \tag{3}$$

Podemos efetuar uma transformada de Legendre a partir da qual escrevemos a energia total como

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\phi'^2}{2} + \frac{\chi'^2}{2} + V(\phi, \chi) \right]. \tag{4}$$

Método BPS (Bogomol'nyi - 1976, Prasad e Somerfield - 1975)

Vamos definir o potencial $V(\phi)$ como sendo

$$V(\phi, \chi) \equiv \frac{W_\phi^2}{2} + \frac{W_\chi^2}{2}. \tag{5}$$

O segundo passo da aplicação do método consiste em manipular o integrando na forma

$$E = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[(\phi' \mp W_\phi)^2 + (\chi' \mp W_\chi)^2 \pm 2\phi' W_\phi \pm 2\chi' W_\chi\right]. \tag{6}$$

Observe que para obtermos a energia mínima não-trivial do sistema é necessário que

$$\phi' = \pm W_\phi \qquad \text{e} \qquad \chi' = \pm W_\chi, \tag{7}$$

que são agora nossas relações para as equações de primeira ordem.

Com isso, podemos finalmente escrever a energia BPS para modelos de dois campos escalares reais, que é dada por

$$E_{BPS} = \pm \int_{-\infty}^{+\infty} dx(\phi' W_\phi + \chi' W_\chi) = \pm \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{dW}{d\chi}, \qquad (8)$$

ou seja,

$$E_{BPS} = |W(\phi(\infty), \chi(\infty)) - W(\phi(-\infty), \chi(-\infty))|. \qquad (9)$$

Desde que $W_{\phi\chi} = W_{\chi\phi}$ podemos verificar que as equações de primeira ordem satisfazem as equações de movimento .

Corrente Topológica

Uma das maneiras de escrevermos essa corrente é considerando

$$J^{\mu} = \epsilon^{\mu\nu}\partial_{\nu}W(\phi,\chi), \tag{10}$$

onde $\mu, \nu = 0, 1$ e $\epsilon^{\mu\nu}$ é o tensor de Levi-Civita - antissimétrico e em duas dimensões ($\epsilon^{01} = 1 = -\epsilon^{10}; \epsilon^{00} = 0 = \epsilon^{11}$). Por causa da antissimetria de $\epsilon^{\mu\nu}$, fica claro que J^{μ} é uma quantidade conservada, ou seja

$$\partial_{\mu}J^{\mu} = 0. \tag{11}$$

Assim, para soluções estáticas, a carga topológica é dada por

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} dx J^{0}, \tag{12}$$

que também é uma quantidade conservada.

Note que $J^{0} = \dfrac{dW}{dx}$, então

$$Q = \Delta W = E_{BPS}. \tag{13}$$

Considerando as equações

$$\phi' = \pm W_\phi \qquad \text{e} \qquad \chi' = \pm W_\chi,$$

é possível determinar a equação da órbita, que relaciona os campos ϕ e χ, que é dada por

$$\frac{d\phi}{d\chi} = \frac{W_\phi(\phi,\chi)}{W_\chi(\phi,\chi)}, \tag{14}$$

daí fica claro que são necessárias técnicas especiais para desacoplar essas equações.

Método da Deformação (Bazeia, Losano e Malbouisson - 2002)

Permite a construção de muitas outras novas teorias analíticas, com solução tipo defeito, a partir de uma teoria original bem conhecida, ou seja

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - V(\phi) \tag{15}$$

e

$$\mathcal{L}_d = \frac{1}{2}\partial_\mu\chi\partial^\mu\chi - U(\chi). \tag{16}$$

A função de deformação f escolhida deve ser tal que

$$f = f(\chi) = \phi, \tag{17}$$

que admite uma inversa

$$\chi = f^{-1}(\phi). \tag{18}$$

Método da Deformação

O método nos dá uma relação para $U(\chi)$, na forma

$$U(\chi) = \frac{V(\phi \to f(\chi))}{f_\chi^2}, \tag{19}$$

que especifica a nova teoria, criada a partir da função deformadora, que tem como solução analítica

$$\chi(x) = f^{-1}(\phi(x)). \tag{20}$$

Método de Extensão do Modelo de Um para Dois Campos (Bazeia, Losano e Santos - 2013)

Vejamos que

$$\phi' = f_\chi \chi' \qquad \text{e} \qquad W_\phi(\phi \to \chi) = f_\chi W_\chi(\chi), \tag{21}$$

então podemos escrever

$$f_\chi = \frac{\phi'(\chi)}{\chi'(\chi)} = \frac{d\phi}{d\chi} = \frac{W_\phi(\chi)}{W_\chi(\chi)}. \tag{22}$$

Ideia chave do método: usar uma função deformadora para reescrever a equação acima como

$$\frac{d\phi}{d\chi} = \frac{W_\phi(\phi,\chi)}{W_\chi(\phi,\chi)}. \tag{23}$$

Método de Extensão

O primeiro passo para efetivar a ideia é reconhecer que a equação de primeira ordem $\phi' = W_\phi(\phi)$ pode ser reescrita de três formas equivalentes

$$\begin{gathered}\phi' = W_\phi(\phi),\\ \phi' = W_\phi(\chi),\\ \phi' = W_\phi(\phi, \chi).\end{gathered}$$

O mesmo pode ser feito para $\chi' = W_\chi(\chi)$, nos dando

$$\begin{gathered}\chi' = W_\chi(\phi),\\ \chi' = W_\chi(\chi),\\ \chi' = W_\chi(\phi, \chi).\end{gathered}$$

Método de Extensão

O segundo passo é utilizar um mecanismo construído para controlar o método.

$$
\begin{aligned}
a_1 + a_2 + a_3 &= 1, \\
b_1 + b_2 + b_3 &= 1, \\
c_1 + c_2 + c_3 &= 0.
\end{aligned}
$$

Utilizando esses parâmetros, podemos efetuar as mudanças:

$$W_\phi \to a_1 W_\phi(\chi) + a_2 W_\phi(\phi, \chi) + a_3 W_\phi(\phi)$$

e

$$W_\chi \to b_1 W_\chi(\chi) + b_2 W_\chi(\phi, \chi) + b_3 W_\chi(\phi),$$

de forma que

$$\frac{W_\phi}{W_\chi} = \frac{a_1 W_\phi(\chi) + a_2 W_\phi(\phi, \chi) + a_3 W_\phi(\phi) + c_1 g(\chi) + c_2 g(\phi, \chi) + c_3 g(\phi)}{b_1 W_\chi(\chi) + b_2 W_\chi(\phi, \chi) + b_3 W_\chi(\phi)}. \tag{24}$$

Método de Extensão

A forma específica de g pode ser obtida ao tirarmos proveito de uma condição que o superpotencial para um modelo de dois campos $W(\phi, \chi)$ obedece, que é

$$W_{\phi\chi} = W_{\chi\phi}. \tag{25}$$

Temos finalmente o vínculo

$$\begin{gathered} b_2 W_{\chi\phi}(\phi, \chi) + b_3 W_{\chi\phi}(\phi) = \\ a_1 W_{\phi\chi}(\chi) + a_2 W_{\phi\chi}(\phi, \chi) + c_1 g_\chi(\chi) + c_2 g_\chi(\phi, \chi), \end{gathered}$$

que é usado para calcular a função g.
Feito isso, podemos finalmente determinar a formal final de $W(\phi, \chi)$, que define um modelo de dois campos, que, por construção, já apresenta um par de soluções.

Twistons no Polietileno Cristalino e Método da Extensão

- Resultados Anteriores

Bazeia e Ventura (1999) abordaram a dinâmica dos *twistons* através de um modelo de dois campos escalares (estáticos)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi + \frac{1}{2}\partial_\mu\chi\partial^\mu\chi - V(\phi,\chi), \tag{26}$$

com potencial

$$V(\phi,\chi) = \frac{1}{2}[\lambda\phi(\phi^2 - \pi^2) + \mu\phi\chi^2]^2 + \frac{1}{2}(\mu\phi^2\chi)^2. \tag{27}$$

Resultados Anteriores

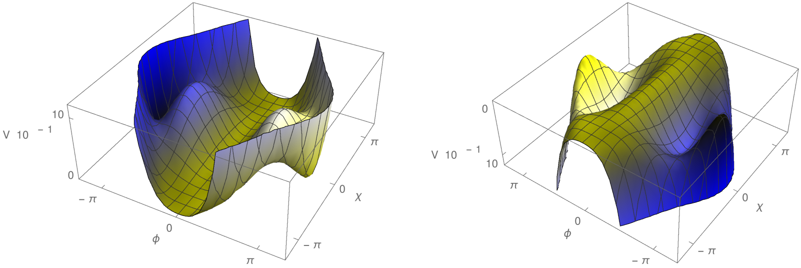

Figure: Potencial V para $\lambda = 1.1$ e $\mu = 1$.

Resultados Anteriores

As equações de primeira ordem são dadas por

$$\phi' = \lambda\phi^3 - \pi^2\lambda\phi + \mu\chi^2\phi \qquad \text{e} \qquad \chi' = \mu\chi\phi^2. \tag{28}$$

Além disso, são encontradas as soluções

$$\phi = \pi\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \tanh\left(\pi^2\mu x\right)\right)} \;\; \text{e} \;\; \chi = \pi\sqrt{\frac{\lambda}{\mu} - 1}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\tanh\left(\pi^2\mu x\right) + 1\right)}. \tag{29}$$

O potencial pode ser obtido do superpotencial, dado por

$$W(\phi,\chi) = \frac{1}{2}\lambda\phi^2\left(\frac{1}{2}\phi^2 - \pi^2\right) + \frac{1}{2}\mu\phi^2\chi^2. \tag{30}$$

Podemos calcular a energia total usando o método BPS

$$E_{BPS} = \frac{1}{4}\lambda\pi^4. \tag{31}$$

Utilizando $|\lambda|\pi^2 = 7.30$ kcal/mol, obtemos $E = 17.99$ kcal/mol.

Novos Modelos para *Twistons*

Método de extensão!!

$$\phi' = W_\phi = \mu\phi(\phi^2 - \pi^2), \tag{32}$$

e tem como solução analítica

$$\phi(x) = \pi\sqrt{\frac{1}{2}(1 - \tanh(\pi^2\mu x))}. \tag{33}$$

Vamos considerar também a seguinte função de deformação

$$f(\chi) = \phi = \sqrt{\pi^2 - \frac{\chi^2}{\gamma^2}} \quad \text{e} \quad f^{-1}(\phi) = \chi = \gamma\sqrt{\pi^2 - \phi^2}, \tag{34}$$

sendo

$$\gamma = \sqrt{\frac{\lambda}{\mu} - 1}. \tag{35}$$

Novos Modelos para *Twistons*

Utilizando a função de deformação chegamos em

$$\chi' = W_\chi = \mu\chi\left(\pi^2 - \frac{\chi^2}{\gamma^2}\right), \tag{36}$$

que é a equação de primeira ordem para o novo modelo de um campo (χ).
Uma vez que conhecemos a solução $\phi(x)$ (33) podemos substituí-la em (34), daí obtemos

$$\chi(x) = \pi\gamma\sqrt{\frac{1}{2}(1+\tanh(\pi^2\mu x))}. \tag{37}$$

Vamos escrever as respectivas equações de primeira ordem na forma

$$W_\phi(\phi) = \mu\phi(\phi^2 - \pi^2), \tag{38a}$$

$$W_\phi(\chi) = \mp\sqrt{\pi^2 - \frac{\chi^2}{\gamma^2}}\left(\frac{\mu\chi^2}{\gamma^2}\right), \tag{38b}$$

$$W_\phi(\phi,\chi) = \lambda\phi(\phi^2 - \pi^2) + \mu\chi^2\phi \tag{38c}$$

e

$$W_\chi(\chi) = \mu\chi\left(\pi^2 - \frac{\chi^2}{\gamma^2}\right), \tag{39a}$$

$$W_\chi(\phi) = \pm\mu\phi^2\gamma\sqrt{\pi^2 - \phi^2}, \tag{39b}$$

$$W_\chi(\phi,\chi) = \mu\chi\phi^2. \tag{39c}$$

Novos Modelos para *Twistons*

Vamos eliminar os termos que possuam raízes. Isso equivale a considerar $a_1 = b_3 = 0$. Além disso, vamos escolher $c_1 = 0$. Assim

$$a_2 = 1 - a_3 \tag{40a}$$
$$b_1 = 1 - b_2 \tag{40b}$$
$$c_2 = -c_3. \tag{40c}$$

Usando a propriedade $W_{\phi\chi} = W_{\chi\phi}$, obtemos

$$c_2 g_\chi(\phi, \chi) = 2\mu(b_2 - a_2)\chi\phi \tag{41}$$

e podemos, por integração direta, determinar $g(\phi, \chi)$

$$c_2 g(\phi, \chi) = \mu(b_2 - a_2)\chi^2\phi. \tag{42}$$

Utilizando a função de deformação podemos determinar $g(\phi)$, que é dada por

$$c_2 g(\phi) = \mu\gamma^2(b_2 - a_2)(\pi^2 - \phi^2)\phi. \tag{43}$$

Substituindo as equações anteriores em

$$\frac{W_\phi}{W_\chi} = \frac{a_1 W_\phi(\chi) + a_2 W_\phi(\phi,\chi) + a_3 W_\phi(\phi) + c_1 g(\chi) + c_2 g(\phi,\chi) + c_3 g(\phi)}{b_1 W_\chi(\chi) + b_2 W_\chi(\phi,\chi) + b_3 W_\chi(\phi)}, \tag{44}$$

obtemos que

$$W_\phi = \phi' = (b_2\gamma^2 + 1)\mu\left(\phi^2 - \pi^2\right)\phi + b_2\mu\chi^2\phi \tag{45}$$

e

$$W_\chi = \chi' = (1 - b_2)\mu\chi\left(\pi^2 - \frac{\chi^2}{\gamma^2}\right) + b_2\mu\chi\phi^2. \tag{46}$$

Finalmente, fazendo integrações diretas das equações acima com respeito a ϕ e χ, respectivamente, obtemos o superpotencial efetivo para o novo modelo de dois campos

$$W(\phi,\chi) = \frac{1}{2}(1-b_2)\mu\left(\pi^2 - \frac{\chi^2}{2\gamma^2}\right)\chi^2 - \frac{1}{2}(b_2\gamma^2+1)\mu\phi^2\left(\frac{\phi^2}{2} - \pi^2\right) + \frac{1}{2}b_2\mu\chi^2\phi^2.$$

Assim

$$V(\phi,\chi)=\frac{\mu^2}{2}\phi^2[(b_2\gamma^2+1)\left(\phi^2-\pi^2\right)\phi+b_2\chi^2]^2+\frac{\mu^2}{2}\left[(1-b_2)\chi\left(\pi^2-\frac{\chi^2}{\gamma^2}\right)+b_2\chi\phi^2\right]^2$$

é o novo potencial encontrado, cujas suas equações de movimento são satisfeitas por (33) e (37).
Da solução (37) vemos que a amplitude do movimento longitudinal é dada por

$$\pi\sqrt{\frac{\lambda}{\mu}-1}. \tag{47}$$

Normalizando $\chi_v = \pm 1$, encontramos que

$$\mu = \frac{\pi^2}{1+\pi^2}\lambda. \tag{48}$$

Assim, escolhendo $\lambda = 7.30/\pi^2$ encontramos que $\mu \approx 0.67$, produzindo uma família de potenciais físicos que podem descrever o comportamento dos *twistons* naturalmente. Além disso

$$E_{BPS} = \frac{\lambda}{4}\pi^4 = 17.99.$$

Novos Modelos para *Twistons*

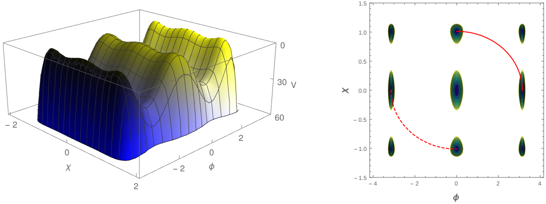

Figure: Esq.: potencial V para $\lambda = 7.30/\pi^2$, $\mu = 0.67$ e $b_2 = 0$. Dir.: contorno de V.

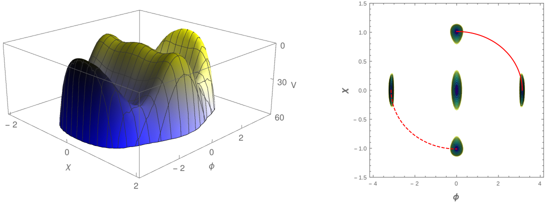

Figure: Esq.: potencial V para $\lambda = 7.30/\pi^2$, $\mu = 0.67$ e $b_2 = 2$. Dir.: contorno de V.

Considerações Finais

- O objetivo de apresentar um potencial explícito com soluções analíticas e que não apresentasse problemas com degenerescência infinita foi alcançado.
- Fizemos uso do método de extensão, a partir do qual encontramos uma família de potenciais que descrevem naturalmente o comportamento de *twistons* em cristais de polietileno.
- Encontramos também que a energia BPS para o novo modelo é consistente com os resultados previamente encontrados.
- Dada a eficiência do método, vemos que há outros modelos descrevendo cristais no polietileno baseados em potenciais seno-Gordon que podem ser revisitados utilizando essa mesma perspectiva.

Referências

- SANTOS, J. R. L. ; BORGES, D. S. S. ; MOREIRA, I. O. . **New family of potentials with analytical twiston-like solutions**. EPL (EUROPHYSICS LETTERS), v. 123, p. 23001, 2018.
- A. de Souza Dutra, J. R. dos Santos, and O. C. Winter. **Extended Class of Exact Twistons and Crystalline Polyethylene**. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 43(36):365- 402, 2010.
- T. Vachaspati, **Kinks and Domain Walls: An Introduction to Classical and Quantum Solitons.**+- New York: Cambridge University Press, 2006.

Obrigada!!