

DAVIDSON REZENDE VIANA

SOBRE A ATENUAÇÃO DE CAMPOS E CORRENTES EM
ISOLANTES TOPOLÓGICOS

Tese apresentada à Universidade
Federal de Viçosa, como parte das
exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, para obtenção
do título de *Doctor Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2015

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da
Universidade Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

V614s
2015 Viana, Davidson Rezende, 1985-
Sobre a atenuação de campos e correntes em isolantes
topológicos / Davidson Rezende Viana. - Viçosa, MG, 2015.
x, 89f. : il. ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador : Winder Alexander de Moura Melo.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f.82-89.

1. Guia de ondas. 2. Isolantes topológicos.
3. Atenuação. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-graduação em
Física. II. Título.

CDD 22. ed. 621.381331

DAVIDSON REZENDE VIANA

SOBRE A ATENUAÇÃO DE CAMPOS E CORRENTES EM ISOLANTES
TOPOLÓGICOS

Tese apresentada à Universidade
Federal de Viçosa, como parte das
exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, para obtenção
do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 5 de fevereiro de 2015.



Jakson Miranda Fonseca
(Coorientador)




Fábio Santos Nascimento



André Luiz Mota



Clodoaldo I. Levartoski de Araújo



Winder Alexander de Moura Melo
(Orientador)

À minha família e meus amigos.

“Deixem que o futuro diga a verdade e avalie cada um de acordo com o seu trabalho e realizações. O presente pertence a eles, mas o futuro pelo qual eu sempre trabalhei pertence a mim.”

(Nikola Tesla)

“Talvez não tenha conseguido fazer o melhor, mas lutei para que o melhor fosse feito.”

(Martin Luther King)

Agradecimentos

Primeiramente, expresso aqui, meu agradecimento à minha família. Meu muitíssimo obrigado à minha mãe Rosália, ao meu pai Joaquim, minha tia Lúcia e aos meus quatro irmãos por estarem constantemente motivando meus estudos, por todo amor e confiança que foram fundamentais para que eu perseverasse em cada adversidade.

A todos meus amigos de república que convivi durante o doutorado, em especial, Gustavo Terra Bastos, Marco Antonio Padilha, Raul Correa, César Melo e Renato Louzada.

Ao orientador, Winder A. Moura Melo, aos coorientadores, Jakson M. Fonseca e Afrânio R. Pereira e Daniel H. T. Franco.

Aos professores Ricardo Cordeiro e Oderli Aguiar pela oportunidade de trabalhar em projetos do Reuni durante dois anos, sem os quais eu estaria sem bolsa.

Aos professores que lecionaram as disciplinas que cursei durante o doutorado, Marcelo Lobato, Sukarno Ferreira, Winder A. Moura Melo, Daniel H. T. Franco e Afrânio R. Pereira.

Aos amigos, Herman F. Fumiã e Fábio S. Nascimento que me acompanharam do mestrado ao doutorado.

Aos amigos, Thiago M. Melo pela parceria e contribuições à pesquisa, Juvenil Siqueira pelas excelentes discussões sobre todo tipo de assunto, à Raquel Freitas pelas conversas bem humoradas e ao aventureiro Marcos Júnio Rezende pela companhia nos épicos acampamentos.

A todos amigos e colegas da pós-graduação com os quais aprendi muito sobre Física e sobre amizade, em especial, Fábio N. Fagundes, Eduardo Ferreira, Saulo Lima, Fabiano

Crisafuli, Isnard Ferraz, Ubirajara Junior, Priscila Silva, Renan Sander, Ricardo Lopes, Ronan Ferreira e Daniel Souza.

Aos professores, funcionários e alunos da FDV, cuja colaboração foi essencial para que eu conseguisse conciliar (com dificuldades) o doutorado e um emprego durante o tempo que fiquei sem bolsa.

Aos professores e funcionários do Departamento de Física da UFV, local que foi praticamente uma segunda casa para mim durante os últimos anos. Por mais difícil que tenha sido, me sinto satisfeitíssimo pela grande experiência adquirida durante esta longa jornada.

À CAPES pelo auxílio financeiro durante os quatro anos.

Sumário

Resumo	ix
Abstract	x
1 Introdução e Motivação	1
2 O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos de HgTe/CdTe	16
2.1 O Modelo Bernevig-Hughes-Zhang em 2D e seus Aspectos Básicos	16
2.2 Controlando Correntes por Meio de uma Barreira de Potencial Eletrostática	22
2.3 Inclusão de Barreira Magnetostática no <i>Bulk</i>	33
2.4 Conclusões Preliminares e Perspectivas	34
3 O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios	37
3.1 Aspectos Básicos da Eletrodinâmica de Áxion para Isolantes Topológicos .	37
3.2 Comparação entre Eletrodinâmica Tipo-Axiônica e Eletrodinâmica CPT- Par com Violação de Lorentz	43
3.3 Conclusões Preliminares e Perspectivas	47
4 Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no <i>Bulk</i> de Isolantes Topológicos	49
4.1 Proposta de Densidades de Carga e Corrente para a Eletrodinâmica de Áxion para Isolantes Topológicos	50
4.2 O Guia de Onda Retangular com Paredes de Isolantes Topológicos	53
4.2.1 Modo Transverso Magnético	62

4.2.2	Modo Transverso Elétrico	65
4.3	Conclusões Preliminares e Perspectivas	67
5	Conclusões	69
	Referências Bibliográficas	82

Unidades, Notações e Convenções

- O Sistema Gaussiano de Unidades foi largamente empregado em quase todo o texto da tese. Seguimos o exemplo da literatura citada que o utiliza por algumas conveniências, entre elas deixar os campos elétrico \vec{E} e magnético \vec{B} com a mesma dimensão.

- Em algumas seções, unidades naturais são utilizadas. Neste sistema, as constantes fundamentais da Física lêem-se: $\hbar = c = G = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = k_B = 1$, de modo que as dimensões seguem a relação: $[comprimento] = [tempo] = [massa]^{-1} = [energia]^{-1}$

- Índices tensoriais quadridimensionais são representados por letras gregas e assumem valores de 0 a 3 (por exemplo, μ, ν , etc).

- Índices tensoriais com letras latinas representam valores de 1 a 3 (por exemplo, i, j, k , etc). É utilizada a convenção de Einstein, a qual diz que, se um monômio possui índices repetidos, fica subentendida uma soma sobre estes índices.

- A métrica de Minkowski (ou tensor métrico "*flat*"), $\eta_{\mu\nu}$, é igual a sua inversa e tem a assinatura: $\eta_{00} = 1$ e $\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = -1$, $\eta^{\mu\nu} = 0 \forall \mu \neq \nu$.

- Os quadrivetores têm a forma covariante $x_\mu = (x_0, -\vec{x})$ e contravariante $x^\mu = (x_0, \vec{x})$ em que a métrica funciona como abaixadora ou elevadora de índices de modo que $x_\mu = \eta_{\mu\nu}x^\nu$.

- Os símbolos de Levi-Civita representados por $\epsilon_{i j k}$ em 3D e $\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}$ em (3+1)D são totalmente antissimétricos tal que, em ambos os casos, se a permutação de índices for par seu resultado é +1, se for ímpar -1. Para os outros casos seu valor é nulo.

- A delta de Kronecker é representada por δ_ν^μ , sendo $\delta_0^0 = \delta_1^1 = \delta_2^2 = \delta_3^3 = 1$ e todos os elementos com os índices $\mu \neq \nu$ são nulos; e também: $tr \delta_\nu^\mu = 4$.

Resumo

VIANA, Davidson Rezende, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, Fevereiro de 2015.
Sobre a Atenuação de Campos e Correntes em Isolantes Topológicos Orientador: Winder Alexander Moura Melo. Coorientadores: Jakson Miranda Fonseca, Afrânio Rodrigues Pereira, Daniel Heber Theodoro Franco.

Nesta tese são apresentados estudos que envolvem dois modelos efetivos para descrever isolantes topológicos. No primeiro capítulo é feita uma introdução a estes novos materiais, mostrando sua relevância no cenário científico atual e da mesma forma motivamos o estudo de novas classes de fenômenos de natureza topológica. No capítulo seguinte é apresentado um estudo do espalhamento de férmions no interior de um poço quântico de um isolante topológico bidimensional utilizando o modelo Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ). No capítulo subsequente comparamos dois modelos eletrodinâmicos em que os campos elétricos e magnéticos aparecem acoplados em termos acrescentados aos da eletrodinâmica de Maxwell para meios. Propomos, em um outro capítulo, fontes para um modelo eletrodinâmico que traz um termo de acoplamento do tipo áxion (não dinâmico, de natureza topológica) modificando as relações constitutivas dos campos elétrico e magnético. Fazendo uso de condições de contorno para os campos em isolantes topológicos 3D, estudamos a propagação de ondas eletromagnéticas no interior de um guia de onda retangular. Propomos uma distribuição específica para as densidades de cargas e correntes que vão além da superfície do isolante topológico, levando-se em conta uma possível penetração em seu *bulk*. Fizemos propostas para descrição do comprimento de penetração nas paredes do guia de onda em que temos ondas evanescentes, refletidas e refratadas dependendo da sua frequência.

Abstract

VIANA, Davidson Rezende, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2015.
On the Attenuation of Fields and Currents in Topological Insulators.
Adviser: Winder Alexander Moura Melo. Co-Advisers: Afrânio Rodrigues Pereira,
Jakson Miranda Fonseca, Daniel Heber Theodoro Franco.

In this thesis are presented studies involving two effective models to describe topological insulators. The first chapter is an introduction to these new materials, showing its relevance in the current scientific scenario and likewise motivate the study of new classes of topological nature of phenomena. In the following chapter we study scattering in a quantum well of a two-dimensional topological insulators using Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) model. In the subsequent chapter we compare two electrodynamic models in which the electric and magnetic fields appear coupled in terms added to Maxwell's electrodynamics (in material media). We propose, in another chapter, sources for a electrodynamic with a axionic coupling term (topological, non-dynamic) modifying the constitutive relations of electric and magnetic fields. Making use of boundary conditions for the fields in 3D topological insulators, we study the propagation of electromagnetic waves inside a rectangular waveguide. We propose a specific distribution for the density of charges and currents that go beyond the surface, enabling effects in the *bulk*. We propose a specific description for penetration length in the walls of the waveguide enabling evanescent, refracted and reflected waves depending on the frequency of the incident radiation.

Capítulo 1

Introdução e Motivação

Entre as teorias da Física existem modelos fundamentais, fenomenológicos e efetivos. O sucesso de cada uma destas abordagens teóricas dependerá do quão complicado é o sistema físico de interesse. O Modelo Padrão (MP) das partículas elementares é um exemplo de descrição em nível fundamental. Segundo esse modelo, tudo que se conhece é consequência dos quarks, léptons e partículas mediadoras das interações fundamentais. Descrever todos os fenômenos da Física em nível fundamental talvez seja o objetivo de muitos físicos que trabalham com alguma Teoria de Unificação (ou Teoria de Tudo), cuja candidata mais famosa é a Teoria de Cordas, que é na verdade, uma hipótese. Matematicamente elegante e ambiciosa, mas uma hipótese, pois ainda não foi testada e comprovada.

Uma questão interessante: É possível descrever tudo em nível fundamental? Fenômenos macroscópicos com incontáveis interações microscópicas podem ser bem entendidos apenas reunindo as informações dos sistemas microscópicos? Até o presente momento, existem fenômenos de Física da Matéria Condensada (FMC) que não podem ser compreendidos como resultado das interações entre conjuntos de quarks e léptons, ou mesmo átomos, que são conjuntos destas partículas. Devido ao número gigantesco de constituintes de qualquer sistema macroscópico ($\sim 10^{23}$ átomos) e da dificuldade hercúlea de tentar descrever suas embaraçadas interações, ainda há muito a ser feito nesse sentido, se for possível realizar tal tarefa. Todavia, há outra forma de pensar que segue um sentido diferente desta linha *reducionista*. Nos últimos anos tem sido frequente o aparecimento

1. Introdução e Motivação

de fenômenos que emergem em sistemas de FMC que desafiam o reducionismo, o qual moldou durante séculos nossa maneira de entender o Universo. Novas partículas não-fundamentais emergem como excitações coletivas, mostrando que a natureza pode ser mais rica se a olharmos por outra óptica.

Uma abordagem teórica fenomenológica se desenvolve a partir de observações empíricas de fenômenos para criar um modelo. Tal modelo pode se aproximar muito de uma teoria fundamental, mas não é derivada dela. Um modelo fenomenológico expressa, matematicamente, os resultados dos fenômenos observados da maneira mais simples possível, sem trazer detalhes de nível mais fundamental. Em muitos casos a fenomenologia pode ser um caminho para a construção de uma descrição fundamental. Um exemplo disso são os estudos fenomenológicos em Física de Partículas elementares, que misturam esforços teóricos e experimentais que convergem para uma descrição que complementa as previsões feitas a partir do MP. Existem teorias fenomenológicas contra e pró-reducionismo.

Em Física, há casos em que equações são conhecidas para uma boa descrição dos fenômenos, mas são muito complicadas de analisar, às vezes, por excesso de variáveis, não linearidade, ou escala do sistema. Há equações microscópicas que contêm mais informações do que as necessárias para resolver um problema macroscópico, e também há o caso contrário, aspectos teóricos de macrossistemas que não podem ser reduzidos. Muitas vezes, o interesse reside em caracterizar o comportamento considerando que variações de parâmetros da pequena escala sejam indetectáveis devido à média macroscópica. Em tais casos quando parâmetros variam lentamente, chamamos estes de *parâmetros de um modelo efetivo*. Um modelo efetivo pode descrever fenômenos em uma escala macro ou microscópica e pode não partir de dados experimentais. Procura-se simplificar e escolher adequadamente os graus de liberdade e muitas vezes supor simetrias para efetuar cálculos e fazer previsões. Em geral estes modelos em Teoria de Campos aplicada à FMC são aproximações em uma escala diferente, (ou dimensões diferentes), de um modelo fundamental ou uma proposta de modelo fundamental. Este tipo de abordagem tem ganhado cada vez mais adeptos nas últimas décadas possibilitando novos estudos, criando novas

1. Introdução e Motivação

áreas principalmente dentro da FMC, onde cada novo material é um “novo universo” a ser estudado. Neste cenário, descobertas têm sido feitas em materiais exóticos que tem surgido devido ao desenvolvimento de novas técnicas experimentais, permitindo investigar antigos e novos modelos efetivos.

Em Teoria Quântica de Campos aplicada à FMC, modelos da física de altas energias são revisados e reinterpretados em um novo contexto levando à descoberta de novas “partículas” não-fundamentais que emergem como excitações coletivas, que chamamos de quasipartículas. São exemplos destas: *spinons*, *holons*, *orbitons*, fônons, *anyons*, *dyons*, e férmions de Majorana. Curiosamente, *spinons*, *holons* e *orbitons* são partículas que surgem da respectiva separação (fracionalização) do *spin*, da carga e da órbita do elétron [1]. Atualmente, há quem diga que todos os modelos tendem a ser efetivos em última análise. Uma das justificativas é a ideia de que existe uma autonomia nos vários níveis de organização dos sistemas físicos, com conjuntos próprios de leis e conceitos. Porém, a discussão segue com grandes controvérsias físicas, filosóficas e matemáticas em um debate pluralístico sobre o que é e como se faz uma explicação científica. Com novidades exóticas advindas de fenômenos em FMC, a discussão se realimenta cada vez mais no que se refere a reducionismo e emergência em física [2, 3].

Uma nova classe de estados topológicos da matéria tem sido estudada com afinco nos últimos anos. Conhecidos como Isolantes Topológicos (IT's), estes novos materiais exibem propriedades exóticas dependendo de aspectos topológicos relacionados às suas funções de onda de Bloch. A estrutura eletrônica destes materiais apresenta uma dispersão de *gap* nulo, similar ao caso do grafeno, tornando-os candidatos à matéria-prima de novos dispositivos spintrônicos. A spintrônica, um neologismo para a eletrônica baseada em *spin*, tem sido estudada com o objetivo da criação de novos dispositivos que serão uma alternativa aos componentes de silício, muito presente em celulares e computadores. Enquanto a eletrônica usa o transporte de carga para criar controle lógico em um dispositivo, a spintrônica usa o *spin* dos portadores de carga, possibilitando uma mudança na maneira como a informação binária é transmitida. Uma das possibilidades seria um computador

1. Introdução e Motivação

quântico, baseado em spintrônica e usaria *qubits* ao invés de bits, possibilitando um aumento da informação superpondo estado de *spins up* e *down*. Todavia a construção e o domínio destes dispositivos dependem de propriedades exóticas de materiais, como os IT's, que ainda não são facilmente reproduzidos e controlados em larga escala [4–6]. Embora os maiores avanços tenham sido recentes, as origens dos estudos de fenômenos topológicos remetem à ordem topológica observada no efeito Hall quântico, na década de 1980.

A diferença entre isolantes, condutores e semicondutores é o tamanho do *gap* de energia entre sua banda de valência e de condução. Isolantes (dielétricos) tem um *gap* suficientemente grande que dificulta a mobilidade dos portadores de carga. Já em um condutor o *gap* é suficientemente pequeno para que os elétrons consigam sair da banda de valência e adquirirem a energia referente à banda de condução. Semicondutores são sólidos geralmente cristalinos que conduzem correntes de forma intermediária entre condutores e isolantes. Contrariamente ao que se observa em bons condutores, em baixas temperaturas, os semicondutores se tornam excelentes isolantes, se forem cristalinos e puros. Além de variações térmicas, o valor do *gap* de energia pode ser manipulado modificando inúmeras outras propriedades dos materiais. Um exemplo prático facilmente visto é quando em uma tempestade, o ar deixa de ser isolante devido a fortes potenciais elétricos superiores à sua rigidez dielétrica, tornando-se um condutor de raios. Assim como neste exemplo, são inúmeros os fenômenos em que verificamos a transição entre isolantes e condutores, isolantes e semicondutores, condutores e supercondutores, etc.

Campos elétricos e magnéticos, densidades de carga e de correntes convencionais são muito bem descritos, quase sempre macroscopicamente, pelo eletromagnetismo de Maxwell. Todavia, efeitos quânticos podem revelar surpresas, como aconteceu em 1930 com a descoberta do efeito Shubnikov-de Haas. O referido fenômeno acontece quando se aplica um forte campo magnético a um material bidimensional a baixas temperaturas, revelando uma oscilação da condutividade longitudinal em relação ao campo magnético, enquanto a condutividade Hall mantém-se linear com este campo. Classicamente, espera-

1. Introdução e Motivação

se que a resistência não dependa do campo neste tipo de sistema. Esta discrepância indicava a grande importância de efeitos quânticos em medidas de transporte eletrônico. O efeito Shubnikov-de Haas é considerado o precursor do efeito Hall quântico [7].

Em uma visão reducionista, dizemos que as partículas responsáveis pelos fenômenos eletromagnéticos são fótons e elétrons. Estes, por sua vez, são descritos pela equação de Dirac acoplada ao campo eletromagnético. Entretanto, é sabido que existem inúmeras descrições que necessariamente devem levar em conta efeitos do conjunto dos elétrons das bandas de valência e de condução que não podem ser descritos individualmente. Além destes elétrons há também as quasipartículas chamadas de buracos (“holes”), que são, numa descrição efetiva, equivalentes aos pósitrons na descrição original de Dirac. Estas partículas podem inclusive ter sua própria corrente com propriedades específicas relacionadas às bandas de cada material.

A procura por novos estados da matéria motiva esforços teóricos e experimentais em FMC. Recentemente, propriedades extraordinárias ligadas a estes estados foram descobertas em novos materiais por meio de avançados processos de síntese e caracterização. O estudo de transições de fase tem se mostrado essencial no entendimento desta nova Física que surge com novos paradigmas. A determinação de fases da matéria é algo suficientemente preciso e bem estabelecido? Simetria sempre foi uma palavra chave para questões deste tipo. Em um sólido, há invariância de translação nas interações entre átomos, porém, devido à quebra desta simetria, por exemplo, num cristal, forma-se um padrão translacional bem definido. Outro exemplo são as interações magnéticas num ímã, que são isotrópicas, mas é sabido que há uma quebra da simetria de rotação no estado ferromagnético, que se caracteriza por um alinhamento dos momentos magnéticos. Estes exemplos são geralmente estudados de acordo com a teoria de Landau das transições de fase, a qual caracteriza estados da matéria de acordo com uma simetria da hamiltoniana que é espontaneamente quebrada. Todavia, existe um outro paradigma de classificação de fases em que a topologia tem papel fundamental.

Em seu livro “Treatise on Electricity and Magnetism” [8] James Clerk Maxwell

1. Introdução e Motivação

discutiu a deflexão da corrente elétrica por um campo magnético e escreveu que a força atuava no condutor e não na corrente. Em 1879, o ainda estudante Edwin H. Hall, duvidando da afirmação de Maxwell, realizou experimentos para se medir o sinal das cargas em um condutor quando trabalhava em sua Tese de Doutorado. Sua montagem experimental consistiu, dentre muitos detalhes, em uma folha de ouro colocada em um campo magnético que a atravessava perpendicularmente. Ele percebeu um fenômeno peculiar: quando um fio percorrido por uma corrente elétrica era exposto a um campo magnético as cargas presentes neste condutor eram submetidas a uma força que fazia com que seu movimento fosse alterado. Ele verificou o surgimento de regiões com carga negativa e outras com carga positiva no condutor. O campo defletiu a corrente para as extremidades e assim foi possível medir uma diferença de potencial entre as bordas e também uma corrente. Com estes dados experimentais calculou uma resistência, $R_{Hall} = V_{Hall}/I$, que atualmente é conhecida como resistência Hall. Com esta verificação ele mostrou que a afirmação de Maxwell estava errada. Em sua homenagem este fenômeno ficou conhecido como efeito Hall.

Curiosamente, em 1975, a natureza quântica do efeito Hall havia sido prevista pelo trio Ando, Matsumoto e Uemura [9], sendo confirmada experimentalmente em 1980 por Klaus von Klitzing *et al*, razão pela qual ganharam o prêmio Nobel em 1985 [10]. Na Figura 1.1 observa-se os degraus da resistência Hall quantizada, que é verificada para campos muito fortes ($\sim 10-15T$) e temperaturas muito baixas ($\sim 1,5K$). Posteriormente intensificaram-se os estudos de sistemas de elétrons efetivamente bidimensionais e o efeito Hall quântico, mostrando que este último também acontece para valores semi-inteiros. Tal descoberta rendeu o Nobel de 1998 [10]. O efeito Hall quântico inteiro ou fracionário é identificado pelo número inteiro ou fracionário que é multiplicado pela razão entre duas constantes fundamentais, que resulta na quantização da condutância (e da resistência) Hall. Em especial no efeito Hall quântico inteiro, a condutância Hall, σ_{Hall} , é proporcional a um número constante conhecido como invariante topológico, que é o múltiplo inteiro, n , das constantes fundamentais da Física: ne^2/h . Este fato não pode ser explicado pela teoria

1. Introdução e Motivação

de Landau, sendo necessário o estudo de propriedades ligadas à topologia das bandas do material.

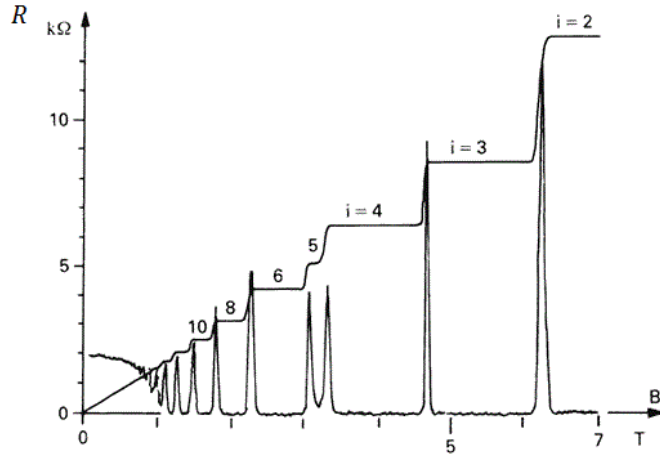


Figura 1.1: Medidas experimentais de resistência (inverso da condutância) do efeito Hall. Observa-se um número inteiro i identificando os degraus cuja altura é $e^2/h \approx 25k\Omega$ que são efeito da quantização. Figura retirada da referência [11].

Quando se calcula a condutância Hall nestes sistemas utilizando a fórmula de Kubo, surge um termo chamado de fase geométrica, ou fase de Berry, $\phi = \oint \vec{\mathcal{A}} \cdot d\vec{k}$, onde $\vec{\mathcal{A}} = \langle \psi_k | -i\vec{\nabla}_k | \psi_k \rangle$. Esse termo é essencial para a compreensão dos degraus do efeito Hall quântico. A fase é invariante sob alterações adiabáticas na hamiltoniana, por consequência, o comportamento dos elétrons não será alterado se mudanças acontecerem adiabaticamente. Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs mostraram que o número inteiro n está associado às funções de onda de Bloch $u(k)$ em uma rede cristalina sujeita a um campo magnético. n é identificado como um invariante topológico, e é chamado de invariante TKNN [12]. O rotacional de \mathcal{A} é a curvatura de Berry, $\vec{\mathcal{F}} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}$, e sua integração nos dá o invariante topológico conforme a expressão:

$$n = \sum_{\text{bandas ocupadas}} \int \frac{d^2k}{2\pi} \mathcal{F} = \sum_{\text{bandas ocupadas}} \int \frac{d^2k}{2\pi} (\langle \partial_{k_1} u | \partial_{k_2} u \rangle - \langle \partial_{k_2} u | \partial_{k_1} u \rangle). \quad (1.1)$$

Em topologia algébrica este número inteiro como resultado recebe o nome de número de Chern, geralmente representado por C . Desta forma, relacionamos uma grandeza física

1. Introdução e Motivação

quantizada a este valor inteiro que depende de propriedades da topologia das bandas.

Em topologia, deformações suaves, conhecidas como homeomorfismos, não rasgam nem criam buracos. Por meio deste tipo de transformação verificamos que objetos geometricamente distintos podem ser topologicamente equivalentes. Por exemplo, um prato e uma bola são topologicamente equivalentes, uma vez que quanto mais achatarmos uma bola (esférica), ela pode se parecer cada vez mais com um prato. Estes dois objetos são homeomorfos e possuem o mesmo *genus* [13]. IT's não interagentes recebem uma classificação topológica dada por um invariante topológico \mathbb{Z}_2 similar à classificação *genus* da topologia associada ao número de Chern. Na classificação $\mathbb{Z}_2 = \pm 1$ englobam-se hamiltonianas invariantes sob reversão temporal. Devido às propriedades topológicas que podem ser identificadas nas curvas e superfícies da zona de Brillouin de um IT, desenvolveu-se uma teoria de bandas topológica. Dentro desta teoria, o estado isolante é a fase eletrônica mais básica da matéria, que é caracterizada por um *gap* proibido de energia entre os estados eletrônicos ocupados (banda de valência) e os estados desocupados (banda de condução). Esses materiais não respondem a ação de um campo elétrico, ou seja, não produzem uma corrente elétrica resultante (até certos limites de campos), mesmo em suas superfícies. Esse processo define uma equivalência topológica entre esses isolantes. Porém, nem todos os materiais isolantes são topologicamente equivalentes. Isolantes topológicos apresentam em seu interior (“*bulk*”) um *gap* proibido de energia, enquanto que suas superfícies ou bordas são condutoras como um metal. O vácuo também faz parte da classe topológica dos isolantes triviais. E a passagem de um isolante trivial para um isolante topológico só poderá ocorrer através de um estado metálico.

O efeito *spin* Hall (ou efeito Hall de *spin*) é um fenômeno parecido com o efeito Hall, mas com orientação de *spins* na corrente das bordas de um material condutor ou semicondutor bidimensional. Quando a corrente inverte seu sentido, os *spins* também se invertem, gerando o efeito *spin* Hall invertido. Este fenômeno foi teoricamente previsto em 1971 por Dyakonov e Perel [14, 15]. A detecção experimental deste fenômeno em filmes finos semicondutores de *GaAs* e *InGaAs* foi feita em 2004 por meio de microscopia

1. Introdução e Motivação

usando a rotação de Kerr, que discutiremos no Capítulo 4 [16]. Em 2005, Kane e Mele [17] estudavam o efeito do acoplamento *spin*-órbita no grafeno, prevendo o efeito Hall quântico de *spin* que consiste em dois efeitos Hall quânticos com portadores de carga com quiralidades opostas, sem nenhum campo magnético aplicado. Como o grafeno não possui grande acoplamento *spin*-órbita, tem sido difícil conseguir a inversão das bandas de valência e condução neste material. Contudo, o efeito *spin* Hall quântico pôde ser observado em poços quânticos de HgTe/CdTe dois anos depois [18, 19].

Os isolantes topológicos ou, também chamados, isolantes *spin* Hall quânticos são materiais que se encontram em um novo estado da matéria protegido por simetria de reversão temporal. São condutores em suas bordas e isolantes em seu interior. Exibem o efeito *spin* Hall quântico que consiste da contrapropagação de partículas carregadas com *spins* opostos, separadas espacialmente em canais distintos, na ausência de campo magnético externo. Isto se torna possível em compostos com grande acoplamento *spin*-órbita, como por exemplo nos materiais, Bi₂Se₃ (seleneto de bismuto), Bi₂Te₃ (telureto de bismuto), Sb₂Te₃ (telureto de enxofre) e HgTe/CdTe (heteroestrutura de telureto de mercúrio e telureto de cádmio), LuPtSb e YPtSb (compostos de Heusler) [19]. Todos estes materiais são sintetizados em laboratório há muitos anos mas não se tinha nenhum composto IT encontrado na natureza. Entretanto no início de 2013 descobriu-se que o já conhecido mineral Bi₂Te₂Se (kawazulita), que pode ser visto na Figura 1.2, é um IT natural [20].

No segundo capítulo desta tese é feito um estudo de IT's bidimensionais com base em um modelo efetivo para entender uma borda metálica com corrente *spin* polarizada e seus limites isolantes no *bulk*. Em poços quânticos de uma heteroestrutura de HgTe/CdTe que fora realizada a descoberta experimental do estado *spin* Hall quântico [18]. Esta heteroestrutura é um material não convencional que possui um *gap* que o caracteriza como isolante em seu interior (*bulk*), e estados de superfície onde partículas carregadas são transportadas preservando a simetria de reversão temporal.

Em artigos sobre IT's, duas simetrias discretas são bastante mencionadas: a pa-

1. Introdução e Motivação

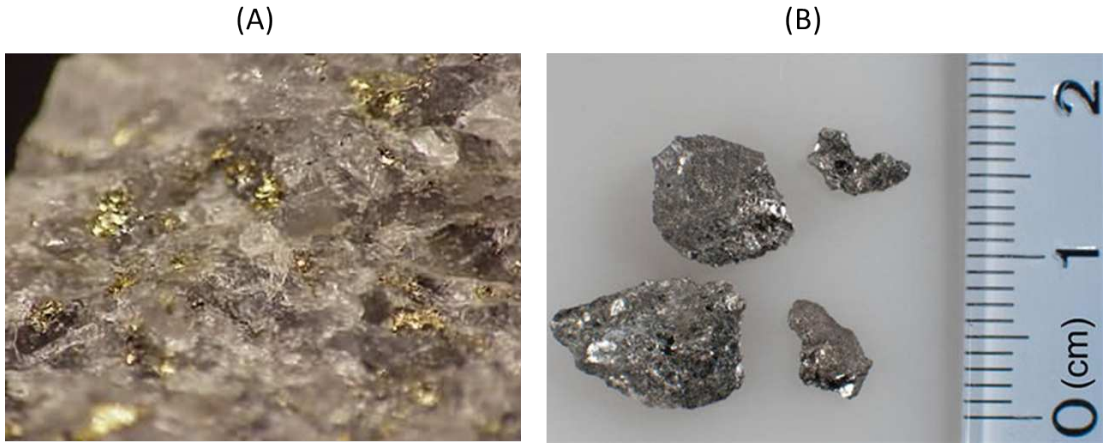


Figura 1.2: O composto Bi_2Te_2Se (kawazulita) é um IT natural encontrado em uma mina de ouro abandonada na república Tcheca por Pascal Gehring *et al*, do Instituto Max Planck. Observa-se o material processado em nanoflocos em (A), e em (B) temos a sua forma bruta em pequenas partes douradas sobre outros minerais. A descoberta foi publicada na revista *Nano Letters* onde são apresentados dados confirmando que este material compete com IT's sintéticos como possível matéria prima para dispositivos spintrônicos. Fonte das figuras: [20].

ridade (ou inversão espacial) e a reversão temporal. A ação do operador de reversão temporal \mathcal{T} inverte o sentido do tempo t e, conseqüentemente dos movimentos, trocando os sinais de algumas grandezas como os momentos linear ($\vec{p} \xrightarrow{\mathcal{T}} -\vec{p}$) e angular, ($\vec{L} \xrightarrow{\mathcal{T}} -\vec{L}$). Desta forma o produto de dois operadores revertidos permanece invariante (por exemplo, $\vec{p}^2 \xrightarrow{\mathcal{T}} \vec{p}^2$, $\vec{p} \cdot \vec{L} \xrightarrow{\mathcal{T}} \vec{p} \cdot \vec{L}$). Já o operador paridade realiza a inversão espacial, $\vec{x} \xrightarrow{\mathcal{P}} -\vec{x}$, de modo a passarmos de um sistema de coordenadas dextrógiro para um levógiro, e vice-versa. Apesar da importância desta última transformação é a reversão temporal que possui papel fundamental nos fenômenos envolvendo IT's. Devido a esta simetria há inúmeros efeitos que distinguem o efeito Hall quântico (inteiro ou fracionário) do efeito Hall quântico de *spin*. Enquanto no primeiro o campo magnético quebra a simetria de reversão temporal e há apenas uma corrente por borda, no segundo há duas correntes por borda e dois números de Chern, n_\uparrow e n_\downarrow , um para cada corrente (com *spins up* e *down*) protegidas topologicamente.

A existência de estados protegidos pela simetria de reversão temporal possui papel essencial para determinar se um material é ou não um IT. O teorema de Kramers afirma

1. Introdução e Motivação

que há degenerescência em qualquer estado de um sistema cujo momento angular total semi-inteiro apresentar simetria de reversão temporal. Isto permite que apenas um número ímpar de estados apresentem degenerescência. Combinando esta simetria de tempo reverso e o forte acoplamento *spin*-órbita, fornece-se a situação favorável à existência de um efeito Hall quântico de *spin* robusto (sem dissipação nem retroespalhamento na borda do material). O acoplamento *spin*-órbita é um efeito que relaciona os movimentos nos orbitais com o grau de liberdade de *spin* das partículas. Nos isolantes topológicos essa característica é capaz de gerar níveis de Landau sem a presença de um campo magnético externo (diferentemente do efeito Hall em condutores e semicondutores).

A estrutura eletrônica dos IT's apresenta uma relação de dispersão entre a energia e o momento sem *gap*, $E = \hbar v_F |\vec{k}|$ similar àquela do grafeno, [4, 21, 22] o que possibilita comparações entre suas propriedades e deste material, que tem sido estudado com afinco nos últimos anos. Outros materiais como o estaneno, siliceno e o germaneno, que são folhas da espessura de um átomo de estanho (*Sn*), silício (*Si*) e germânio (*Ge*), respectivamente, possuem forte acoplamento *spin*-órbita, viabilizando o estudo do efeito *spin* Hall quântico. Muito do que se tem estudado para o grafeno serviu de preparação para estas novas promessas que possuem estrutura cristalina hexagonal ¹. O estaneno ainda não foi verificado experimentalmente. O germaneno é um isolante topológico à temperatura ambiente, todavia o siliceno não o é, colocando o primeiro como um material mais promissor para possíveis aplicações spintrônicas [6, 23, 24].

A identificação das propriedades eletrônicas dos IT's têm sido estudadas utilizando uma técnica experimental sofisticada chamada de ARPES, acrônimo do termo em inglês *Angle Resolved Photoemission Spectroscopy*, ou em português, espectroscopia de fotoelétrons resolvida em ângulo, que permite obter informações da estrutura de bandas (dispersão eletrônica) de acordo com a direção e a velocidade das partículas carregadas na superfície do material. Nesta técnica, os fótons emitidos por uma lâmpada especial co-

¹Siliceno, germaneno e estaneno (cujas propriedades são previstas) possuem estrutura cristalina hexagonal como o grafeno, porém a rede do germaneno possui algumas deformações conhecidas como *bucklings*, que são deslocamentos de alguns átomos na direção perpendicular ao plano a rede.

1. Introdução e Motivação

lidem com uma amostra mantida em um ambiente de ultra alto vácuo e arrancam seus elétrons (efeito fotoelétrico). Um espectroscópio de alta resolução faz medições das propriedades desses elétrons, e desta forma detecta-se os estados destes elétrons no material. Esta técnica foi essencial na descoberta dos IT's. Alguns pesquisadores utilizam ARPES e outra técnica combinada, bem mais conhecida, chamada LEED, acrônimo para *Low-energy electron diffraction*, ou difração de elétrons de baixa energia. Atualmente, essa é a técnica mais utilizada na determinação de estruturas de superfícies em escala atômica [25, 26]. Há também trabalhos experimentais usando técnicas de microscopia de varredura por tunelamento [27] e ressonância magnética nuclear [28]. Estas três últimas técnicas experimentais citadas determinam propriedades das superfícies dos IT's. Pouco se tem estudado sobre os estados na interface, por exemplo, entre IT's e semicondutores, ou IT's e isolantes triviais, nos motivando a fazer maiores investigações neste sentido.

Um dos fenômenos mais interessantes que surge em IT's é o chamado efeito magnetoelétrico topológico, que se deve à resposta elétrica (polarização) quando se aplica um campo magnético e, do mesmo modo, uma magnetização na presença de um campo elétrico. Há uma teoria efetiva para descrever fenômenos eletromagnéticos em IT's por meio de um campo não dinâmico, conhecido como ângulo de áxion, θ . Das equações de movimento desta teoria, obtêm-se relações entre deslocamentos elétricos $\vec{D} = \epsilon\vec{E} + 4\pi\vec{P} + \frac{\alpha\theta}{\pi}\vec{B}$ e campos magnetizantes $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu} - 4\pi\vec{M} - \frac{\alpha\theta}{\pi}\vec{E}$. Nesta proposta, as equações de Maxwell para meios materiais não são alteradas em sua forma usual, comumente encontrada em livros texto de electromagnetismo, como nas referências: [29–31]. A lagrangiana efetiva para descrever esta nova classe topológica de fenômenos originou-se da Física de Partículas, em uma tentativa de resolver a quebra de CP forte em interações interquarks [32]. Posteriormente, vieram estudos em teorias de campo topológicas que ganharam notoriedade em FMC, adquirindo nova interpretação para sistemas de baixas energias. Sob condições de contorno periódicas, a função de partição advinda desta teoria e todas as propriedades físicas são invariantes se $\theta = 0$, ou $\theta = \pi$, devido a simetria de reversão temporal e a topologia do *bulk* que é independente de propriedades geométricas e mecânicas. Nesta

1. Introdução e Motivação

teoria de campos topológica, o termo tipo-áxion, adicionado à lagrangiana de Maxwell é um coeficiente quantizado em termos da constante de estrutura fina $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$. Tal modelo possibilita uma nova definição metrológica de três constantes fundamentais da física, sendo c a velocidade da luz, e a carga do elétron, e $\hbar = h/2\pi$ a constante Planck normalizada [33]. Uma das consequências do acoplamento entre os campos elétricos e magnéticos originados neste termo topológico, é que ao aproximarmos uma carga elétrica puntiforme da superfície de um IT, surgem vórtices de correntes devido às componentes tangenciais dos campos elétricos, que geram um campo magnético de modo que a carga imagem no interior do material pode ser tratada como um *dyon*, uma quasipartícula que possui carga elétrica e magnética, ou um monopolo magnético imagem, tal como mostrado na Figura 1.3.

1. Introdução e Motivação

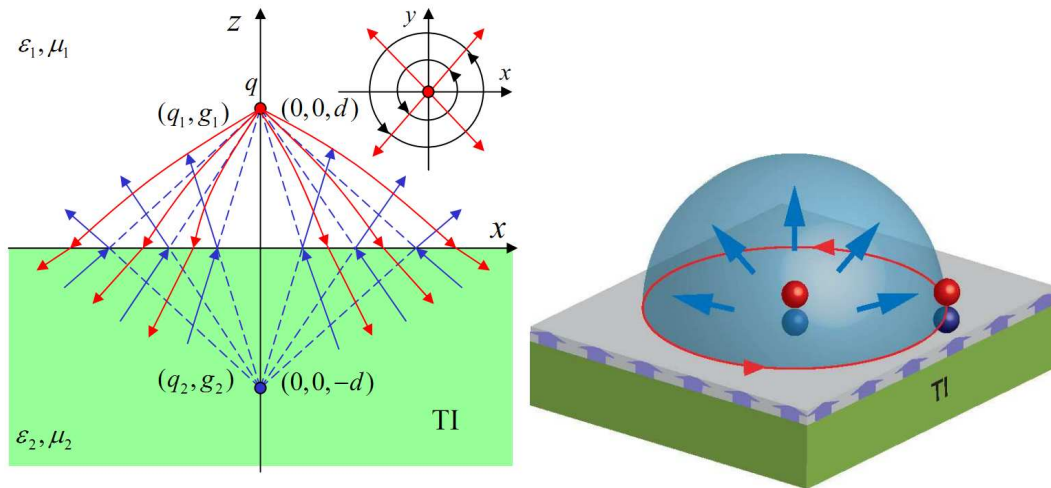


Figura 1.3: A figura acima ilustra dois meios divididos pelo plano xy , sendo o primeiro um isolante trivial como o ar (ou o vácuo) com constantes do material, ϵ_1, μ_1 , em $z > 0$ e o segundo é um IT em $z < 0$, com ϵ_2, μ_2 , que geralmente é coberto por um filme ferromagnético (como na figura da direita). As linhas de campos elétricos são representadas pelas linhas vermelhas e as de campos magnéticos pelas azuis. Vista da região superior, devido à presença de uma carga elétrica puntiforme q_1 no ponto $(0,0,d)$, há a formação de uma carga elétrica imagem q_2 e uma carga magnética imagem g_2 (ou monopolo magnético imagem) em $(0,0,-d)$. Ilustrada no topo e à direita desta figura, vemos a forma circular da corrente Hall devido à carga q_1 próxima do IT. A configuração dos campos é tal que vista do plano inferior temos a formação de uma carga imagem magnética g_1 também na interface superior. Logo, identificamos a mesma configuração de um *dyon* tanto em $(0,0,d)$ como em $(0,0,-d)$. Na figura à direita, observamos que há um *dyon* para cada elétron e sua imagem. Figura retirada da referência [34].

Esta tese apresenta no terceiro e no quarto capítulos, estudos de aspectos eletromagnéticos (também com consequências ópticas). Ao confinar a radiação, ou seja, impor condições de contorno nas equações de Maxwell ou nas equações de onda, podemos verificar o comportamento de interfaces de IT's, cuja peculiar resposta magnetoelétrica é evidenciada na forma distinta dos campos em cada problema abordado.

Um dos fatos motivadores desta tese é a dificuldade que se tem para obter um IT com *bulk* perfeitamente isolante. Resultados experimentais dos últimos anos mostraram que obter uma estrutura reproduzível com estados de borda/superfície perfeitamente definidos não é tarefa fácil e muitas vezes há grande desafio para adequar experimento e teoria. Quando se trata principalmente de IT's tridimensionais, ainda não há um trabalho

1. Introdução e Motivação

experimental que tenha observado a completa ausência de corrente dentro do material. Os dois materiais, que até meados de 2013, mostraram-se mais promissores, o seleneto de bismuto (Bi_2Se_3) e telureto de bismuto (Bi_2Te_3) apresentam alguma condutividade interna e mais algumas correntes residuais devido a imperfeições da rede e impurezas. Neste sentido propomos algumas contribuições a modelos efetivos para incluir estes efeitos dissipativos numa tentativa de descrever de forma mais completa os isolantes topológicos em duas e três dimensões de acordo com os resultados experimentais [5, 19, 27, 28, 35, 36].

Capítulo 2

O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos de HgTe/CdTe

Neste capítulo são apresentadas algumas aplicações do modelo BHZ em problemas de espalhamento em mecânica quântica em uma heteroestrutura de HgTe/CdTe. Diferentemente de trabalhos mais comuns sobre IT's que tratam da borda do material, nossos resultados mais interessantes estão relacionados às correntes e campos que adentram o *bulk*.

2.1 O Modelo Bernevig-Hughes-Zhang em 2D e seus Aspectos Básicos

Para a construção do modelo, devemos levar em conta uma série de propriedades importantes dos materiais envolvidos. Tanto o HgTe quanto o CdTe possuem uma estrutura cristalina do tipo *zinc blend* com redes cúbicas de corpo centrado transladadas ao longo da diagonal do cubo, mas com um átomo distinto em cada subrede. Como há duas espécies atômicas por base, a simetria de paridade é quebrada. Porém, como foi mostrado no referência [19], a quebra desta simetria não altera essencialmente a física do IT. Nos dois materiais as bandas mais importantes estão próximas do ponto Γ na primeira zona

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

de Brillouin. Como esquematizado na Figura 2.1, teremos uma banda do tipo s (Γ_6), uma do tipo p que foi separada por meio do acoplamento *spin*-órbita, tendo momento angular total dado por $J = 3/2$ (Γ_8) e outra semelhante à anterior, apenas com $J = 1/2$ (Γ_7). A estrutura de bandas do CdTe pode ser parcialmente explicada usando-se as regras de Hund ¹.

Conforme essas regras, o estado de menor energia terá o maior valor de *spin* e de momento angular orbital, então as bandas de energia mais baixas devem ser as Γ_7 e Γ_8 . O cádmio possui camada fechada, de modo que não existe uma regra de Hund para o valor de J no estado fundamental; contudo a referência [19] informa que resultados experimentais sugerem $J = 1/2$. Desta forma, a banda de condução será a Γ_6 , enquanto a de valência será a Γ_8 . O valor do *gap* entre elas é $E_g = E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8} \sim 1,6 \text{ eV}$. No HgTe, o ordenamento das bandas é invertido devido ao forte acoplamento *spin*-órbita. A energia do *gap* neste caso é negativa $\approx -300 \text{ meV}$, indicando que a banda de buraco leve Γ_8 , que geralmente é uma banda de valência, se tornou a banda de condução e a de buraco pesado é a primeira banda de valência. Γ_6 é uma banda de valência abaixo do nível de Fermi para este material.

A massa efetiva é obtida pela curvatura da relação de dispersão das bandas tanto de elétrons como buracos: $m^* = \frac{\hbar}{\partial^2 E / \partial k^2}$. Observando a Figura 2.1, a concavidade para cima está relacionada à massa dos elétrons e concavidade para baixo, dos buracos. Bandas menos curvadas são chamadas de bandas de elétrons (ou buracos) pesados e as mais curvadas de elétrons (ou buracos) leves. A banda Γ_8 possui duas massas efetivas e muda

¹As regras de Hund são, resumidamente: 1^a: Para uma dada configuração eletrônica, em que n elétrons estão nos níveis $2(2l + 1)$ de um subnível parcialmente preenchido, o termo de máxima multiplicidade possui a mais baixa energia. A multiplicidade é igual a $2S + 1$ onde S é o momento angular de *spin* total destes elétrons. Portanto, o termo com menor energia também é a expressão máxima de S . O que é consistente com o princípio da exclusão de Pauli. 2^a: O momento angular orbital total L , dos estados mais baixos possui o maior valor de acordo com a primeira regra e o princípio da exclusão. 3^a: O momento angular total J , pode assumir valores entre $|L-S|$ e $L+S$ de acordo com as regras de composição dos momentos angulares quando os subníveis de energia estão preenchidos em menos da metade. Um termo do tipo $\lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$ acrescentado à hamiltoniana favorecerá o valor máximo de J se λ for positivo. Mais detalhes podem ser vistos na referência [37].

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

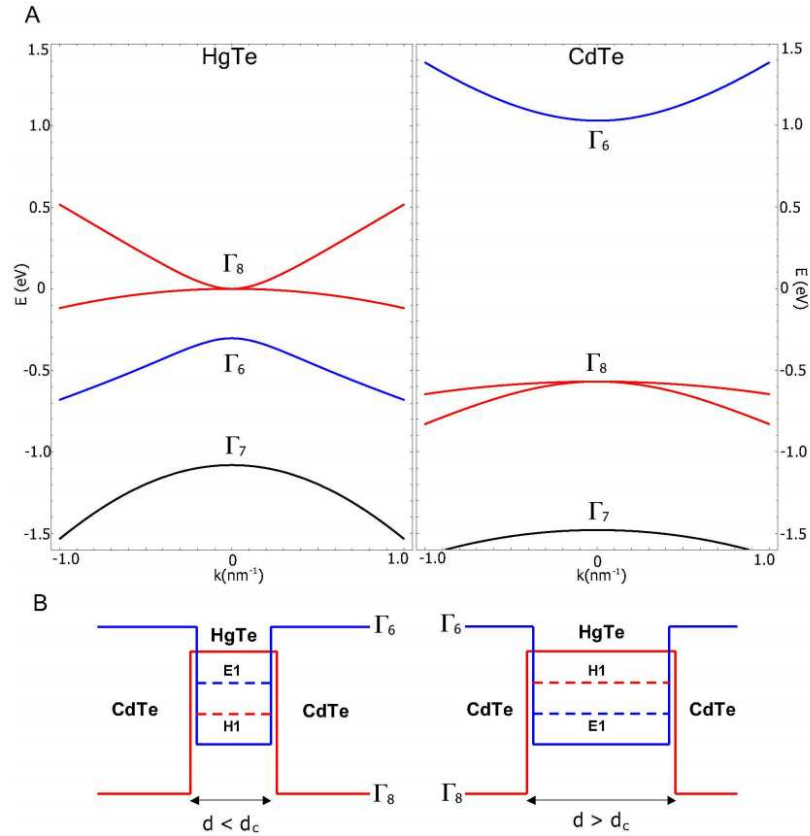


Figura 2.1: Em (A) vemos uma figura que esquematiza as estruturas de bandas do HgTe e do CdTe, bem como as curvaturas relacionadas às massas de cada banda. À direita no HgTe, se verifica a troca de ordem das bandas Γ_6 e Γ_8 , possibilitando a existência do estado *spin* Hall quântico. Em (B) verifica-se a inversão das sub-bandas E_1 e H_1 relacionadas às bandas Γ_6 e Γ_8 . A mudança acontece devido ao aumento da largura do poço quântico de HgTe além do valor crítico d_c . Figura retirada da referência [19].

seu papel em cada material. No HgTe, a banda de buraco leve que possui menor massa efetiva e se torna a banda de condução, enquanto a de buraco pesado se torna a banda de valência ². Devido à degenerescência entre as bandas de buraco pesado e buraco leve o HgTe é um semiconductor de *gap* nulo.

Nossa intenção em descrever IT's deve levar em conta as regras para partículas fermiônicas portadoras de carga nestes sistemas. Devido à degenerescência de Kramers, as bandas de energia em um sistema de férmions invariante por reversão temporal ocorrem

²Em alguns materiais bidimensionais como o grafeno é possível obter um efeito em que a curvatura de bandas é nula, implicando numa relação de dispersão linear $E = \hbar v_F |\vec{k}|$

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

sempre aos pares. Shen *et al* [38] mostraram que estes pares podem ser descritos por meio de algumas modificações no hamiltoniano de Dirac ³, possibilitando a descrição da transição de fase de um sistema topologicamente trivial para um não-trivial. Tomemos o hamiltoniano modificado:

$$\mathcal{H}_{mod} = c\hat{\alpha} \cdot \vec{p} + (mc^2 - Bp^2)\beta \quad (2.1)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo, $\hat{\alpha}$ e β são as matrizes propostas por Dirac na construção da primeira forma matricial de sua hamiltoniana. O termo de correção quadrático no momento, $-Bp^2$, é o responsável pela transição quando a massa m for negativa e o parâmetro B tiver um valor fixo. Os espinores soluções da equação de autovalores, $\mathcal{H}_{mod}\Psi = E\Psi$, localizados nas proximidades de ambas as bandas de valência e condução, caracterizam estados de borda topologicamente protegidos.

Isolantes topológicos bidimensionais exibem uma borda metálica peculiar que foi primeiramente descoberta em poços quânticos de HgTe/CdTe [39, 40]. Estes estados de borda possuem polarização de *spin* e quiralidade bem definida e uma corrente de férmions que circunscribe o material sem que haja dissipação. Bernevig, Hughes e Zhang desenvolveram o modelo efetivo, conhecido como BHZ, para descrever o efeito *spin* Hall quântico e previram a transição de fase entre um isolante trivial e um IT em um poço quântico de HgTe como função da largura do poço como na Figura 2.2.

O modelo BHZ em 2D, que é de interesse neste trabalho, descreve o comportamento de portadores de carga em uma heteroestrutura de CdTe/HgTe sendo que a região de HgTe possui uma largura d . Um isolante topológico seria descrito pelo modelo para larguras maiores que um largura crítica d_c . A hamiltoniana deste modelo descreve um regime estacionário dentro de um poço quântico criado pela diferença de energia entre as sub-bandas mais próximas ao nível de Fermi destes materiais, chamado de regime invertido, que se refere à inversão das sub-bandas do HgTe conforme a Figura 2.1 [19]. Levando em

³Para alguns detalhes sobre o hamiltoniano de Dirac veja o Apêndice A

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

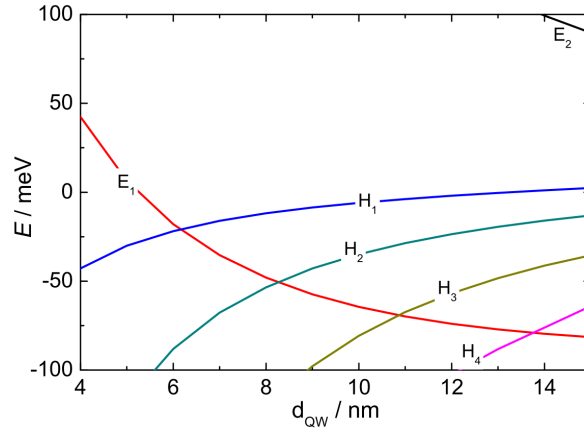


Figura 2.2: Níveis de energia do poço quântico em função da sua largura. Os estados de energia relacionados à banda de buraco pesado (Γ_8 , a banda de condução) são denotados por H_n , o estado da banda de valência (Γ_6) é denotados por E_1 . O estado *spin* Hall quântico acontece a partir do ponto onde as curvas vermelha (E_1) e azul (H_1) se cruzam anulando o *gap* de massa M em uma largura crítica $d = d_c \sim 6,3\text{nm}$. Para larguras maiores, esse *gap*, dado pela diferença $E_1 - H_1$, terá um valor negativo, pois as sub-bandas foram invertidas. Figura retirada da referência [19].

conta a inversão, as bandas relevantes E_1 e H_1 se tornam degeneradas devido à simetria de reversão temporal e ao teorema de Kramers. Estes estados podem ser ordenados da seguinte forma: $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$, onde $|E_1\pm\rangle, |H_1\pm\rangle$ são os pares de Kramers. Usando argumentos gerais de simetria e tomando apenas termos em menor ordem no momento $p = \hbar k$, por simplicidade e argumentos de simetria, constrói-se uma outra hamiltoniana [19] de forma coerente com a equação (2.1), que lê-se:

$$H(k) = \begin{bmatrix} \mathcal{H}(k) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}^*(-k) \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

em que $\mathcal{H}(k) = \epsilon(k)\mathbf{1}_{2\times 2} + \sum_i d_i(k)\sigma_i$ é o bloco relacionado ao *spin up* e seu complexo conjugado ao *spin down*; $\mathbf{1}_{2\times 2}$ é a matriz identidade e σ_i são as matrizes de Pauli; $d_1 = Ak_x$, $d_2 = Ak_y$, são os termos de hibridização, $d_3 = M - B(k_x^2 + k_y^2)$ é um tipo de termo de massa onde B e M são conhecidas como parâmetros de massas Newtoniana e de Dirac, respectivamente; $\epsilon(k) = C - D(k_x^2 + k_y^2)$. A, B, C, D e M são parâmetros experimentais

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

manipuláveis que dependem da geometria do poço quântico. C é o mínimo de energia ou a energia de Fermi próxima ao ponto- Γ (normalizamos esta energia tomando $C = 0$). Também fixamos $D = 0$ uma vez que não há efeitos desta constante sobre a transição de fase e propriedades topológicas não dependem dela, assim ganhamos uma hamiltoniana com simetria partícula-buraco [41, 42]. É interessante observar que se a massa de Dirac M for nula, o que acontece no ponto- Γ , onde as bandas se tocam, o modelo é similar a duas cópias do hamiltoniano de Dirac sem massa, com estados duplamente degenerados. Este par está ligado ao par de *spins up e down* dos elétrons. Tal hamiltoniano é bastante utilizado no estudo do grafeno. M será positiva ou negativa de acordo com a largura crítica do poço d_c , sendo positiva e cada vez maior quanto menor for esta largura.

A Hamiltoniana é separável nas direções x e y : $H = H_0(x) + H_1(y)$. A parcela dependente apenas da direção x descreve as partículas que se movem em direção ao *bulk* do material e lê-se:

$$H_0 = \begin{bmatrix} M - Bk_x^2 & Ak_x & 0 & 0 \\ Ak_x & -M + Bk_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -M + Bk_x^2 & -Ak_x \\ 0 & 0 & -Ak_x & -M + Bk_x^2 \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

Esta parcela descreve partículas de Dirac em estados massivos que adentram o material com valor não nulo do seu *gap* de massa $\tilde{M} = M - Bk^2$, diminuindo a velocidade até o interior. A parte dependente apenas de y é explicitamente:

$$H_1 = -Dk_y^2 + \begin{bmatrix} -Bk_y^2 & iAk_y & 0 & 0 \\ -iAk_y & Bk_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -Bk_y^2 & iAk_y \\ 0 & 0 & -iAk_y & +Bk_y^2 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Nesta direção, que corresponde à extrema borda do material, a massa de Dirac é nula e as partículas possuem velocidade de Dirac $v_D \approx 5,5 \times 10^6 m/s$ e se movimentam em dois

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

sentidos diferentes (y positivo e y negativo), que são canais espacialmente separados e que possuem partículas com *spins* contrários. No sentido y positivo viajam partículas com *spin down* e y negativo *spin up*. A Figura 2.3

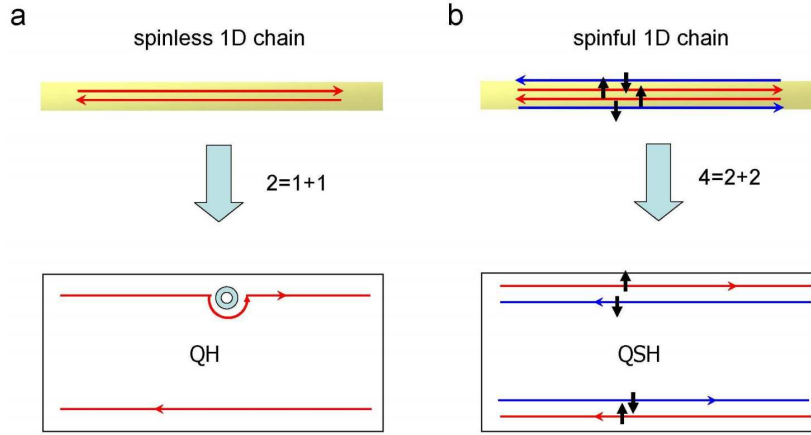


Figura 2.3: Figura esquemática das correntes do efeito Hall quântico. Em (a) não há polarização de *spin* dos portadores de carga. Há duas correntes em sentido opostos (uma em cada borda), sendo que estas são capazes de contornar pequenas impurezas. No efeito Hall quântico de *spin* em (b), temos quatro correntes com dois estados de polarização de *spin* para cada borda em canais espacialmente separados ao longo da direção que tomaremos como eixo y . É importante ressaltar que em (a) a simetria de reversão temporal é quebrada e em (b) ela é preservada. Figura retirada da referência [43]

2.2 Controlando Correntes por Meio de uma Barreira de Potencial Eletrostática

Estudamos o efeito de uma barreira de potencial eletrostática inserida dentro do poço de HgTe modificando os estados eletrônicos dos férmions que adentram o *bulk* do material com velocidade na direção x , conforme a Figura 2.4 . Uma vez que a simetria translacional é preservada ao longo de y (onde os férmions fluem livremente e sem barreira), nós tomamos $d_2 = 0$ na equação (2.2), tal que nossa hamiltoniana toma a forma:

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

$$H_{\text{eff}} = H_0(k_x) + \mathbf{1}_{4 \times 4} V(x) = \begin{bmatrix} \tilde{M} + V(x) & Ak_x & 0 & 0 \\ Ak_x & -\tilde{M} + V(x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{M} + V(x) & -Ak_x \\ 0 & 0 & -Ak_x & -\tilde{M} + V(x) \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Aqui, M é igual à diferença de energia entre os dois níveis mais próximos ao nível de Fermi, $|E_1, +(-)\rangle$ e $|H_1, +(-)\rangle$. Se o *gap* for nulo, o que acontece no ponto Γ , teremos duas cópias do hamiltoniano de Dirac não-massivo com estados duplamente degenerados que possuem polarizações distintas entre si. $V(x) = V_0\Theta(x - x_0)$ é o potencial degrau⁴ que pode ser criado como uma ponte (*back gate*) ou uma impureza distribuída extensamente dentro do material em $x > x_0$, em uma região próxima à borda. Este mecanismo permite filtrar as partículas e redirecioná-las a um canal diferente de condução de acordo com o *spin* uma vez que a simetria de reversão temporal é preservada próxima à borda. Na ausência dos potenciais, M é positiva se a largura d for menor que um valor crítico $d_c \approx 6,3\text{nm}$. Neste caso teremos uma fase isolante. Entretanto, se a largura for maior que d_c teremos $M < 0$ levando a uma fase condutora cujos estados se localizam na borda exibindo o efeito *spin* Hall [18, 19, 40]. Nesta tese, propomos que a borda pode ter um tamanho variável e que em algumas situações o *bulk* não seja completamente isolante até um certo comprimento de decaimento que pode ser estudado por meio das barreiras que propomos. O sinal relativo entre A e B determina se os isolantes topológicos tem estados de borda protegidos ou não, o que nos permite analisar uma possível reversão de *spin*. O termo de massa $M(k_x) = M - Bk_x^2$, é dependente do vetor de onda k_x e o *gap* M é fixo.

⁴A função degrau, nomeada como $\Theta(x - x_0)$ assume o valor 1 em $x \geq x_0$ e é nula em $x < x_0$

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

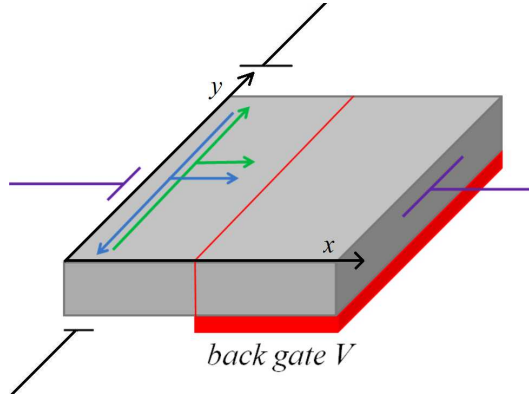


Figura 2.4: Figura esquemática das correntes com *spin up* (setas verdes) e *spin down* (setas azuis) ao longo da direção da borda no eixo y e penetrando no *bulk* (setas menores) no eixo x . A região com o potencial $V(x)$ (vermelha) representada por uma barreira que bloqueia ou atenua os feixes de partículas incidentes.

Tabela 2.1: Tabela com valores experimentais para os parâmetros do modelo BHZ para o poço quântico de CdTe/HgTe. Observamos que para todos os valores desta tabela $4MB < A^2$. Contudo, os valores do *gap* M variam abruptamente com a largura do poço d , enquanto B varia menos. Nesta tese propomos a descrição de um poço mais largo que possivelmente teremos $4MB > A^2$, seguindo a tendência destes valores. Tabela retirada referência [19].

d (Å)	A (eV Å)	B (eVÅ ²)	M (eV)
55	3,87	-48,0	0,009
61	3,78	-55,3	-0,00015
70	3,65	-68,6	-0,010

Ao substituirmos um *ansatz*, $\Psi(x) \propto e^{\lambda x}$, como feito na referência [19], obtemos a relação entre duas raízes $\lambda_{1,2}$ e as constantes do modelo: $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2B} (A \pm \sqrt{A^2 - 4MB})$. Ao observarmos a tabela (2.1) com valores experimentais típicos para poços quânticos de HgTe/CdTe, vemos que em todos os casos medidos, essas raízes são valores reais. Todavia, para poços quânticos mais largos, o módulo $|MB|$ cresce consideravelmente, enquanto o parâmetro A possui menor variação. Nesta tese propomos, com base nesta observação,

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

uma situação hipotética seguindo a tendência dos parâmetros, e, de acordo com um tamanho maior do poço, tenhamos $4MB > A^2$, habilitando possíveis soluções com uma parte oscilatória e uma parte atenuada no *bulk* para um poço consideravelmente maior que 7 nm . Como são poucos dados para os parâmetros, (devido à complexidade dos experimentos) “fitar” uma estimativa estatística é algo impreciso, e nos permite apenas comparar alguns dados. Por meio do método de mínimos quadrados uma solução oscilatória seria habilitada para $d \approx 9,5\text{ nm}$. Desta forma a raiz quadrada daria a parte complexa do número de onda na direção x e somente a razão $A/2B$ seria a parte real do mesmo, cujo inverso do seu módulo seria o comprimento de decaimento dos estados de borda.

Ao compararmos os blocos do hamiltoniano BHZ (2.2) com a equação original de Dirac e suas soluções, descrevemos os férmions de Dirac do sistema (elétrons e buracos) resolvendo o problema de autovalores:

$$H_{\text{eff}}(k_x \rightarrow i\partial_x) \Psi(x) = (E - V(x)) \Psi(x), \quad (2.6)$$

para duas regiões diferentes do *bulk*: fora ($x < x_0$) e dentro da barreira ($x \geq x_0$). Obtemos as soluções incidente (i), refletida (r) e transmitida (t):

$$\Psi_i = \mathcal{A}_i^\uparrow e^{kx} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{Ak_1}{E+M(k_1)} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

$$\Psi_r = \mathcal{A}_r^\uparrow e^{-k_r x} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{-Ak_1}{E+M(k_1)} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \mathcal{A}_r^\downarrow e^{-k_r x} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{-Ak_1}{E+M(k_1)} \end{bmatrix}, \quad (2.8)$$

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

$$\Psi_t = \mathcal{A}_t^\uparrow e^{k'x} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{Ak_2}{E-V_0+M(k_2)} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \mathcal{A}_t^\downarrow e^{k'x} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{Ak_2}{E-V_0+M(k_2)} \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

onde $k = a + ik_1$, $k_r = a_r + ik_1$ e $k' = a' + ik_2$, são os módulos dos vetores de onda incidente, refletido e transmitido respectivamente. As constantes $a < 0$, $a' < 0$ e $a_r > 0$, são assumidas como não nulas devido à tentativa de se descrever efeitos dissipativos que se relacionam com os comprimentos de atenuação, $l_1 = 1/|a|$, $l_r = 1/|a_r|$ e $l_2 = 1/|a'|$. Sem a existência da barreira, o valor de a é a razão $A/2B$ que seguindo a tendência da tabela 2.1, seu módulo se torna cada vez menor quanto maior for a largura do poço. As soluções incidente, refletida e transmitida são representadas pelo espinor:

$$\Psi(x) = \Theta(x + x_0) \left[\Psi_i^\uparrow(x) + \Psi_r^\uparrow(x) + \Psi_r^\downarrow(x) \right] + \Theta(x - x_0) \left[\Psi_t^\uparrow(x) + \Psi_t^\downarrow(x) \right]. \quad (2.10)$$

Por meio destas soluções obtemos as relações de dispersão entre E e k , fora e dentro da barreira, que são:

$$\begin{cases} E^2 = A^2k_1^2 + M^2(k_1) & \text{(fora da barreira)} \\ (E - V_0)^2 = A^2k_2^2 + M^2(k_2) & \text{(dentro da barreira).} \end{cases} \quad (2.11)$$

A dispersão na borda é obtida por meio dos autovalores de H_1 , substituindo um espinor com a forma de (2.7), com solução puramente oscilatória, $\propto e^{ik_y y}$. Outra forma é obter a hamiltoniana 2×2 da borda, projetando separadamente cada estado de *spin*, conforme a referência [19], resultando numa hamiltoniana simples: $H_{borda} = Ak_y \sigma^z$ que possui autovalores de energia apenas para um *spin* que dependerá do sinal de k_y . A dispersão na borda com os dois sinais, um para cada *spin* é simplesmente $E = \pm Ak_y$. Ambas as formas levam à obtenção da mesma velocidade dos férmions (de grupo e de fase). Tal quantidade é conhecida como velocidade de Dirac (na direção y), que para um poço de $7nm$, seu valor é $v_D = A/\hbar \approx 5,5 \times 10^7 cm/s$. Esta é a velocidade máxima

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

que os férmions que descrevemos assumirão dentro do IT de acordo com este modelo. A componente da velocidade em direção ao *bulk*, $v_x < v_D$, possui um valor maior quanto mais largo for o poço. Se considerássemos um *bulk* perfeitamente isolante esta velocidade seria nula longe da borda, todavia, nosso interesse é na situação em que o *bulk* não é completamente isolante, mas semiconductor, ou um condutor ruim, por isso propomos o regime onde $A^2 < 4MB$, permitindo uma atenuação menor nas correntes que adentram o material para investigar melhor seus efeitos. As velocidades de fase dentro e fora da barreira, calculadas a partir da dispersão no *bulk*, são:

$$v_{f1} = \pm \sqrt{v_D^2 - \frac{\tilde{M}(k_1)^2}{\hbar^2 k_1^2}} \quad (\text{fora da barreira}), \quad (2.12)$$

$$v_{f2} = \pm \sqrt{\left(v_D^2 - \frac{V_0}{\hbar^2 k_2^2}\right)^2 - \frac{\tilde{M}(k_2)^2}{\hbar^2 k_2^2}} \quad (\text{dentro da barreira}). \quad (2.13)$$

Esta diferença entre as velocidades de fase significa que os férmions de Dirac que adentrarem a barreira serão refratados, pois o índice de refração se relaciona à velocidade de fase por $n = c/v_f$. Como o potencial degrau é uma constante subtraída da energia, a velocidade de grupo permanece a mesma dentro e fora da barreira:

$$v_{g1,2} = \pm v_D \sqrt{1 - \frac{A^2}{4MB}}. \quad (2.14)$$

Este resultado exato e simples, foi obtido usando a parte complexa do número de onda. Uma vez que $A^2 < 4MB$, fora deste regime esta expressão não é válida. O comportamento da velocidade de grupo das partículas neste regime pode ser visto na Figura 2.5.

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

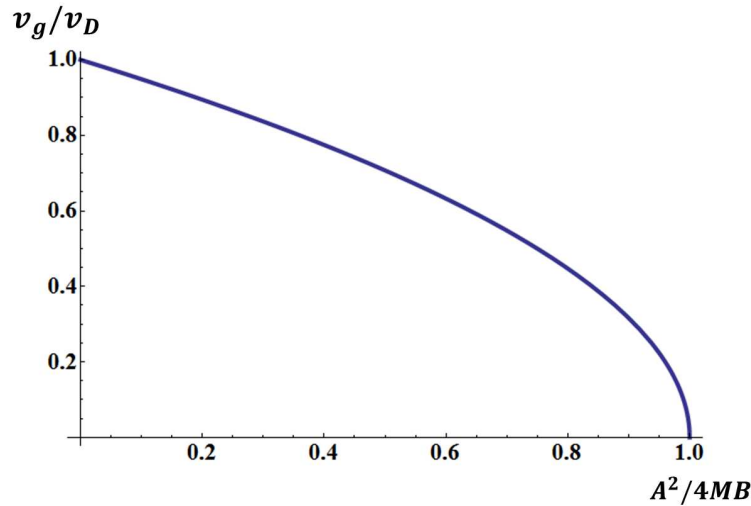


Figura 2.5: Gráfico da razão entre a velocidade de fase e a velocidade de Dirac em função da razão entre os parâmetros experimentais do modelo $A^2/4MB$. De acordo com nossa proposta, seguindo os dados experimentais 2.1, os valores do produto $4MB$ aumentam com o tamanho do poço, assim como A^2 tem pequenas variações. Por conseguinte, o modelo prediz que no limite de um poço infinitamente largo a velocidade dos férmions é a velocidade de Dirac dos estados de borda, o que é equivalente a um plano dielétrico homogêneo, isotrópico e não-dispersivo de tamanho infinito.

Por meio de condições de contorno em $x = x_0$, calculamos os fatores de normalização levando às relações: $\mathcal{A}_i^\uparrow = (1 + \Omega)\mathcal{A}_t^\uparrow$, $2\mathcal{A}_r^\uparrow = (1 - \Omega)\mathcal{A}_t^\uparrow$ e $\mathcal{A}_r^\downarrow = -\Omega\mathcal{A}_t^\downarrow$. Onde $\Omega = \frac{k'}{k} \frac{E+M(k_1)}{E+M(k_2)-V_0}$. Além das peculiaridades que propomos neste regime, uma diferença de tratamento para o usual espalhamento de partículas de spin 1/2 por uma barreira eletrostática é a não nulidade dos fatores \mathcal{A}_r^\downarrow e \mathcal{A}_t^\downarrow , implicando necessariamente que uma barreira eletrostática num IT é capaz de mudar o *spin* dentro do *bulk*. Sob a óptica da simetria de reversão temporal, uma barreira eletrostática não interferiria no *spin* para um problema de feixe de elétrons livres incidentes num condutor ou semiconductor. Porém, existe uma abordagem para semicondutores descrita por V. I. Perel *et al*⁵, em que um potencial eletrostático simétrico tipo-degrau (barreira não-magnética) pode inverter o *spin* eletrônico em um *bulk* semiconductor se o potencial for forte [44]. Tal proposta afirma que o tunelamento por si só é naturalmente dependente do *spin* para materiais com acoplamento

⁵O mesmo que previu o efeito Spin Hall Quântico, juntamente com Dyakonov

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

spin-órbita consideravelmente grandes. Para descrever esta situação, a interação *spin*-órbita dentro da barreira seria responsável por quebrar a simetria de reversão temporal, porém é necessário acrescentar uma correção na hamiltoniana de Dirac chamada de termo de Dresselhals, que para partículas viajando na direção x é: $H_{Dres} = \gamma(\sigma_y k_y - \sigma_z k_z) \partial_x^2$. Nosso problema reside no fato que estamos trabalhando com o modelo BHZ para IT's e não Dirac, ainda que os modelos apresentem similaridades. Uma proposta de termo de Dresselhals para IT's é uma perspectiva deste trabalho. Uma vez que um termo deste tipo possa existir para o HgTe, consideramos as amplitudes *spin down* como não-nulas e que são correções dependentes de γ que é um parâmetro experimental no termo de Dresselhals. Incluindo essa ideia na nossa descrição, temos correntes com dois *spins* no *bulk* do HgTe como ilustrado na figura 2.6.

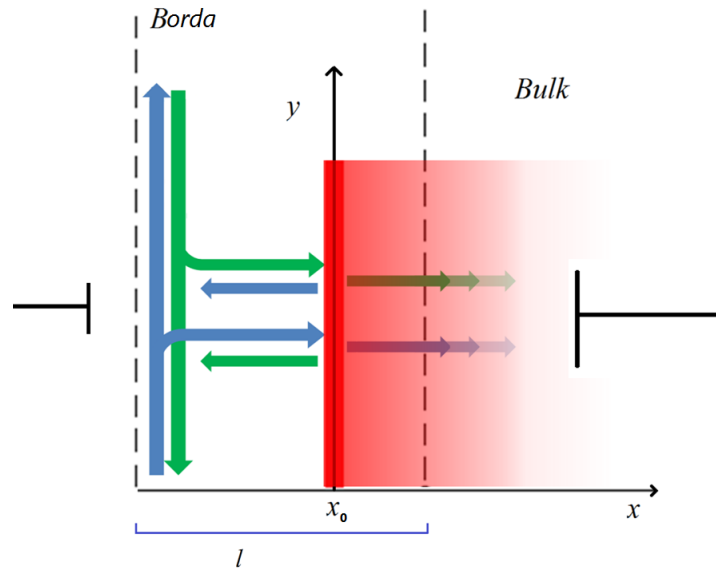


Figura 2.6: Ilustração das correntes com *spin up* (verde) e *spin down* (azul) saindo e retornando da borda. O retângulo vermelho representa o potencial degrau e l é o comprimento de decaimento dos estados de borda sem influência da barreira. As correntes refletidas tem *spins* invertidos e alimentam as correntes sem *gap* na borda novamente devolvendo-a a um canal diferente.

As (densidades de) correntes médias *spin*-polarizadas foram calculadas por procedimentos mecânico-quânticos usuais, ou seja, pelo valor esperado do operador corrente ⁶

⁶Na eletrodinâmica quântica, a corrente é calculada pelas componentes espaciais da corrente vetorial

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

associado a cada um dos blocos do hamiltoniano 2.5, ou seja, $J_x = \langle \hat{J}_x \rangle = \Psi^\dagger \frac{\partial H_0(k_x)}{\partial k_x} \Psi$, e são, para cada região, explicitamente:

$$J_i^\uparrow = 2|\mathcal{A}_i^\uparrow|^2 \left\{ Bk_1 + \frac{A^2 k_1}{E + \tilde{M}(k_1)} + \frac{BA^2 k_1^3}{[E + \tilde{M}(k_1)]^2} \right\} e^{2|a|(x-x_0)}$$

$$(x \leq x_0), \quad (2.15)$$

$$J_r^\uparrow = 2|\mathcal{A}_r^\uparrow|^2 \left\{ Bk_1 + \frac{A^2 k_1}{E + \tilde{M}(k_1)} + \frac{BA^2 k_1^3}{[E + \tilde{M}(k_1)]^2} \right\} e^{2|a_r|(x-x_0)}$$

$$(x \leq x_0), \quad (2.16)$$

$$J_t^\uparrow = 2|\mathcal{A}_t^\uparrow|^2 \left\{ Bk_2 + \frac{A^2 k_2}{E - V_0 + \tilde{M}(k_2)} + \frac{BA^2 k_2^3}{[E - V_0 + \tilde{M}(k_2)]^2} \right\} e^{-2|a'|(x-x_0)}$$

$$(x \geq x_0), \quad (2.17)$$

as correntes com *spin down*, obtidas pelo segundo bloco da hamiltoniana, são:

$$J_r^\downarrow = 2|\mathcal{A}_r^\downarrow|^2 \left\{ Bk_1 + \frac{A^2 k_1}{E + \tilde{M}(k_1)} + \frac{BA^2 k_1^3}{[E + \tilde{M}(k_1)]^2} \right\} e^{2|a_r|(x-x_0)}$$

$$(x \leq x_0), \quad (2.18)$$

$$J_t^\downarrow = 2|\mathcal{A}_t^\downarrow|^2 \left\{ Bk_2 + \frac{A^2 k_2}{E - V_0 + \tilde{M}(k_2)} + \frac{BA^2 k_2^3}{[E - V_0 + \tilde{M}(k_2)]^2} \right\} e^{-2|a'|(x-x_0)}$$

$$(x \geq x_0). \quad (2.19)$$

A conservação da corrente total é assegurada: $J_{i\uparrow} = J_{r\uparrow} + J_{r\downarrow} + J_{t\uparrow} + J_{t\downarrow}$, o que pode ser facilmente verificado na fronteira $x = x_0$. Analogamente, as correntes da borda foram de Dirac, $J^i = e\bar{\Psi}\gamma^i\Psi$. Entretanto, no modelo BHZ as bases não são construídas de acordo com as mesmas representações das matrizes. No apêndice A, as matrizes podem ser consultadas para comparação entre as correntes.

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

calculadas por meio da hamiltoniana H_1 para comparação, $J_y = \langle \hat{J}_y \rangle = \Psi^\dagger \frac{\partial H_1(k_y)}{\partial k_y} \Psi$, e leem-se:

$$J_{y\pm} = \pm 2Bk_y |\mathcal{A}_y|^2 \left[1 + \frac{A^2 k_y^2}{(E - Bk_y^2)^2} \right] \quad (2.20)$$

$$\text{(sobre o eixo } y, +\text{para canal } \uparrow \text{ e } -\text{ para canal } \downarrow\text{).} \quad (2.21)$$

As correntes da borda contrapropagam em sentidos opostos com *spins* contrários sem dissipação, estas assumem uma forma mais simples, por não dependerem do termo de massa de Dirac M e, principalmente, devido à ausência da exponencial atenuante dependente de a ou a' que são parâmetros experimentais do modelo. As correntes do *bulk*, em parte, possuem termos que se assemelham à forma de J_y que caem com o inverso do termo de massa newtoniana Bk^2 , mas possuem o decaimento exponencial em direção ao *bulk* e dependência com o potencial V_0 .

Os férmions que retornam com *spins* invertidos estão ilustrados na Figura 2.6. Estes viajam em sentido oposto ao da corrente incidente. É importante ressaltar que conforme a referência [19], se uma pequena impureza estiver no caminho do elétron, ele irá contorná-la no sentido horário ou anti horário implicando numa mudança na fase de sua função de onda de π e $-\pi$, respectivamente, ou seja, uma rotação de 2π como um todo. Como a função de onda para partículas de *spin* $1/2$ troca de sinal com este valor na fase, há uma interferência destrutiva anulando a propagação de feixes no sentido oposto. Para evitar este efeito, a barreira eletrostática é extensa o suficiente para não ser contornada. Além disso, com base na proposta de Perel *et al*, se a barreira por si só já é capaz de inverter o *spin* devido ao acoplamento *spin*-órbita do material, um grande conjunto de elétrons sairia e entraria na borda de locais distintos, transladados na direção y com a separação espacial entre os canais de condução, com diferentes amplitudes e velocidades indo e voltando na direção x , conforme calculamos. Por essas razões a interferência destrutiva da corrente retroespalhada seria pouco provável.

Como as amplitudes *spin down* ficaram indeterminadas, por meio das correntes, obtemos a reflectância e a transmitância dos férmions de Dirac, com *spin up* que são:

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

$$R^\uparrow = \frac{|1 - \Omega|^2}{|1 + \Omega|^2} e^{-2(|a| - |a_r|)(x - x_0)}, \quad (x \leq x_0), \quad (2.22)$$

$$T^\uparrow = 4\Omega \frac{k_2 k}{k_1 k'} \frac{e^{-2(|a| - |a'|)(x - x_0)}}{|1 + \Omega|^2}, \quad (x \geq x_0). \quad (2.23)$$

Onde a probabilidade se conserva $R + T = 1$, sendo $R = R_\uparrow + R_\downarrow$ e $T = T_\uparrow + T_\downarrow$. O fator Ω precisa ser explicitado para a análise dos valores de energia possíveis para o tunelamento. Manipular o potencial V_0 nos permite obter informações sobre cenários distintos dependendo do valor relativo da energia dentro da barreira, $E + M(k_2) - V_0$. Reescrevendo a transmitância:

$$T^\uparrow = \frac{4k_2}{k_1 |1 + \Omega|^2} \frac{\left(E + \tilde{M}(k_1)\right)^2}{\left(E - V_0 + \tilde{M}(k_2)\right)^2} \left[\frac{B(E - V_0 + \tilde{M}(k_2))^2 + \overbrace{A(E - V_0 + \tilde{M}(k_2) + BA^2 k_2^2)}^{\phantom{A(E - V_0 + \tilde{M}(k_2) + BA^2 k_2^2)}}}{B(E + \tilde{M}(k_1))^2 + A(E + \tilde{M}(k_1) + BA^2 k_1^2)} \right] \times \quad (2.24)$$

$$\times e^{-2(|a| - |a'|)(x - x_0)}.$$

Logo, um potencial fraco, $V_0 < E + \tilde{M}(k_2)$, leva a um tunelamento cuja forma se parece com o caso não-relativístico, implicando em parte refletida e parte transmitida, porém com o fator de atenuação. Dentro da barreira, a atenuação é menor, devido à desigualdade existente entre os comprimentos de atenuação entre os estados de borda, $\frac{1}{|a|} < \frac{1}{|a'|} \Rightarrow l_1 < l_2$, que são consequência da equação (2.23).

Com um valor de potencial médio, $E - \tilde{M}(k_2) < V_0 < E + \tilde{M}(k_2)$, k_2 se torna imaginário puro. O comprimento de decaimento dos estados de borda dentro da barreira se torna $l_2 = \frac{1}{|a - k'|}$. Esta mudança na exponencial modifica as correntes transmitidas e consequentemente o coeficiente de transmissão. Neste caso particular o vetor de onda dentro da barreira é $k' = a' - k_2$ que é um número real e por esta razão, a onda dentro da barreira é completamente atenuada, ou seja, as soluções da equação de autovalores tem parte oscilatória somente na região fora da barreira. A transmitância se torna:

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

$$T^\uparrow = 4\Omega \frac{k_2 k}{k_1 k'} \frac{e^{-2(|k_2|+|a|-|a'|)(x-x_0)}}{|1+\Omega|^2}, \quad (x \geq x_0). \quad (2.25)$$

Em outras palavras, um potencial médio dentro da barreira força o retorno ao regime totalmente atenuado, parecido com o caso em que $A^2 > 4MB$, em que não há soluções oscilatórias no *bulk*.

Analisando a equação (2.24) para um potencial forte, $V_0 > E + \tilde{M}(k_2)$, podemos verificar que no regime oscilatório, $A^2 < 4MB$, k_1 é real e positivo, e o termo indicado tem o sinal dominante tornando a transmissão negativa, criando algumas possibilidades, uma delas é que a razão k_2/k_1 tenha que ser negativa também para compensá-la, mas isso muda a interpretação do sentido das partículas conforme convencionou-se e vemos que um feixe de partículas refletidas seria maior que o incidente, violando a conservação da probabilidade. Este dilema nos leva ao conhecido Paradoxo de Klein. Porém, neste sistema ele apresenta peculiaridades devido à diferença entre os parâmetros se compararmos à eletrodinâmica quântica, mas principalmente pelo tunelamento com decaimento exponencial. A interpretação física para esta situação é: o potencial é forte o suficiente para termos um cenário com partículas e antipartículas (elétrons e buracos), em que os buracos, (que viajam no sentido oposto dos elétrons), estão associados às soluções de energia negativa para o modelo BHZ dentro das condições propostas.

2.3 Inclusão de Barreira Magnetostática no *Bulk*

Além da primeira proposta da barreira eletrostática que nos permitiu a análise de um possível paradoxo de Klein, nesta seção discutimos a possibilidade da inclusão de uma impureza magnetostática nesta mesma região, o que quebraria a simetria de reversão temporal com um campo externo. Desta forma as correntes de *spin down* que foram transmitidas podem ter relação com o parâmetro γ do termo de Dresselhals, entretanto, no tratamento usual da eletrodinâmica quântica e também do modelo BHZ elas tem que ser não-nulas de forma independente deste termo, por consequência da quebra da simetria de reversão temporal. Todavia, obedecem relações entre amplitudes com a mesma forma

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

da seção anterior.

Inserimos na hamiltoniana (2.5), o potencial vetor magnético por meio do calibre de Landau dentro do degrau, $\vec{A} = (0, A_y, 0)$, em que $A_y(x) = \Theta(x-x_0)B_zx$, sendo B_z o campo magnético constante. É importante observar que a hamiltoniana permanece separável com a escolha deste calibre. Desta forma temos um campo magnético perpendicular permeando o filme do HgTe em $x > x_0$, onde também mantemos o potencial eletrostático, $V(x) = V_0\Theta(x-x_0)$. Nesta proposta o operador momento tem sua prescrição modificada: $\hbar k_x \rightarrow i\partial_x - \frac{q}{\hbar c}A_y(x)$, coerentemente, a equação de autovalores se torna:

$$H_{\text{eff}}(k_x \rightarrow i\partial_x - \frac{q}{\hbar c}A_y(x))\Psi(x) = (E - V(x))\Psi(x). \quad (2.26)$$

Para duas regiões diferentes do *bulk*: fora ($x \leq x_0$) e dentro da barreira ($x \geq x_0$), obtemos as soluções incidente, refletida e transmitida de maneira análoga à seção anterior, cujos espinores mantêm a mesma forma, exceto pela mudança no vetor de onda k_2 , agora dependente do valor de B_z e, conseqüentemente no termo de massa dentro da barreira, que lê-se: $\tilde{M}(k_2) = M - B(k_2 - \frac{q}{\hbar c}A_y)^2$. As correntes *spin* polarizadas dentro do degrau também sofrem esta modificação. Observando novamente a equação (2.24), temos um efeito diferente: o termo responsável pelo paradoxo na seção anterior, será modificado por $A [E - V_0 + M - B(k_2 - \frac{q}{\hbar c}A_y)^2]$, mas a razão k_2/k_1 também será. Para campos muito fracos os resultados permanecem próximos dos obtidos na seção anterior, desde que seja verificada a desigualdade $E - V_0 > \tilde{M}(k_2)$, desta forma a criação de pares (partícula-buraco) pode ser inibida pela barreira magnetostática se $\tilde{M}(k_2) > V_0 - E$.

2.4 Conclusões Preliminares e Perspectivas

Revisamos propriedades básicas do modelo BHZ e analisamos as relações entre os parâmetros do mesmo para o estudo de correntes no *bulk* do HgTe. Obtemos soluções para um regime específico em que propomos a desigualdade, $A^2 < 4MB$, o que implicaria, segundo dados experimentais da tabela 2.1, que o poço quântico seria mais largo $d \approx 9,5nm$. Elaboramos uma proposta neste regime, que é um mecanismo de filtro de *spin*

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

ilustrado na Figura 2.6 para redirecionamento de férmions retroespalhados para canais da borda topologicamente protegidos. Tal proposta, colocada de forma simples, é original e permite acrescentar informações aos mecanismos de manipulação de *spin* em IT's da literatura [45, 46]. Apresentamos de forma simples uma maneira de avaliar diferenças de corrente entre os canais usando uma barreira não magnética no *bulk* e ao mesmo tempo propor a quebra da reversão temporal por efeito de interação entre a barreira e o acoplamento *spin*-órbita que acarretaria em amplitudes não nulas em correntes com *spin* invertido num IT 2D, o que tem sido obtido para semicondutores [44]. Verificamos que as correntes atenuadas no *bulk* podem apresentar cenários distintos para diferentes potenciais, como um potencial médio que atenua todas as soluções para os espinores dentro da barreira e, como caso mais peculiar um potencial forte que obedece a desigualdade $V_0 > E + \tilde{M}(k_2)$ que habilita um tipo de paradoxo de Klein atenuado, dependente de parâmetros do modelo que figuram na transmitância. Também discutimos a possibilidade de acréscimo de uma barreira eletrostática e magnetostática no interior do HgTe que poderia dificultar a criação dos pares partícula-buraco, aumentando o termo de massa que suprime o potencial dentro da barreira. Um artigo com os resultados deste capítulo está em preparação para submissão [47].

Como perspectivas, pretendemos estudar o acréscimo de um termo tipo-Dresselhaus [44] na hamiltoniana do modelo BHZ e compará-lo com termos de inversão de bandas (BIA) e inversão estrutural (SIA) que estão na literatura [19, 48] e aparecem como correções incluindo efeitos de interação *spin*-órbita de forma distinta. Também pretendemos estender o estudo da transmissão de elétrons e efeitos de borda para o materiais 3D com tunelamento entre superfícies, com troca de canais por correntes que atravessam o *bulk*.

Outra possibilidade é o estudo do acoplamento entre supercondutor e um IT 2D, possibilitando estados de borda para férmions de Majorana que seriam habilitados de acordo com espinores soluções do modelo Bogoliubov-de Gennes-Dirac [19], que nada mais é que o BHZ com um termo adicional tipo matriz potencial de emparelhamento. Como a diagonal secundária desta matriz é não nula, a reversão temporal é quebrada explicita-

2. O Modelo BHZ no Estudo das Correntes Spin-Polarizadas em Poços Quânticos Bidimensionais de HgTe/CdTe

mente, permitindo o estudo de reversão de spin de férmions de Majorana.

Capítulo 3

O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

Neste capítulo apresentamos brevemente, revisamos e comparamos propriedades básicas de dois modelos eletrodinâmicos, a saber: eletrodinâmica axiônica efetiva para descrição de IT's e eletrodinâmica CPT-par Lorentz-ímpar do Modelo Padrão Estendido. Ambas possuem em suas lagrangeanas termos que acoplam os campos elétricos e magnéticos adicionados aos usuais de Maxwell. Mostramos que maneiras diferentes de escrever os campos usando matrizes permitem novas interpretações e analogias.

3.1 Aspectos Básicos da Eletrodinâmica de Áxion para Isolantes Topológicos

No formalismo canônico e manifestamente covariante, o eletromagnetismo clássico pode ser derivado da densidade lagrangiana:

$$\mathcal{L}_{Maxwell} = -\frac{1}{8\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} A_\mu J^\mu, \quad (3.1)$$

sendo $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ o tensor eletromagnético, $A^\mu = (\phi, \vec{A})$ o 4-vetor potencial eletromagnético e $J^\mu = (\rho, \vec{J})$ a 4-corrente. A ação, $S = \int \mathcal{L} d^4x$, correspondente à lagrangiana (3.1), é invariante sob transformações de calibre abelianas locais: $A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) - \partial_\mu \Lambda(x)$, que tem como consequência a conservação da carga elétrica. Das equações

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

de Euler-Lagrange, obtemos as equações de movimento, que juntas à identidade de Bianchi são as equações de Maxwell na forma tensorial: $\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} J^\nu$, $\partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = 0$, sendo a segunda uma identidade geométrica tal que $\partial_\gamma F_{\alpha\beta} + \partial_\beta F_{\gamma\alpha} + \partial_\alpha F_{\beta\gamma} = 0$ [49]. O dual do tensor eletromagnético é $\tilde{F}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta}$, sendo que $F_{oi} = -E^i$ e $-F^{ij} = \epsilon^{ijk} B^k$.

O tensor energia-momento canônico advindo da lagrangiana (3.1) pode ser simetrizado¹ para descrever a densidade e o fluxo de energia e momento eletromagnéticos, dados por:

$$\Theta^{\mu\nu} = -F^{\mu\gamma} F_\gamma^\nu + \frac{1}{4}\eta^{\mu\nu} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta}, \quad (3.2)$$

que é uma quantidade conservada, $\partial_\mu \Theta^{\mu\nu} = 0$. Sua simetria, $\Theta^{\mu\nu} = \Theta^{\nu\mu}$, garante a conservação do momento angular e está associada à isotropia do espaço-tempo.

As equações de Maxwell na forma diferencial (local) em notação trivetorial² escritas em unidades gaussianas num meio material com permissividade elétrica ϵ e permeabilidade magnética μ , são:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi\rho \quad (3.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{1}{c}\partial_t \vec{D} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} \quad (3.4)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c}\partial_t \vec{B} = 0. \quad (3.6)$$

Estas equações trazem uma grande quantidade de informação sobre os campos $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$ e $\vec{H} = \frac{1}{\mu}\vec{B}$, bem como sobre suas fontes, densidade de carga elétrica ρ e vetor densidade de corrente \vec{J} . A Lei de Gauss (3.3), mostra como cargas produzem campos elétricos. A Lei

¹O tensor energia-momento canônico para o campo eletromagnético $T^{\mu\nu}$ não é simétrico, mas é possível simetrizá-lo por meio de uma soma de uma parte simétrica e outra antissimétrica para obtermos o chamado tensor energia-momento simétrico, em que $\Theta^{\mu\nu} = \Theta^{\nu\mu}$. Detalhes podem ser vistos na referência [29].

²Esta notação para as equações de Maxwell deve-se a Heaviside e Gibbs, que simplificaram a representação original de Maxwell, que possuía vinte equações na forma de quatérnions [8].

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

de Ampère-Maxwell (3.4) mostra como corrente elétrica e campo elétrico variável no tempo produzem campo magnético. A divergência nula do campo magnético na equação (3.5) garante a ausência de monopolos magnéticos. Vemos também que variações temporais de campo magnético produzem campos elétricos, conforme a Lei de Faraday (3.6). Na ausência de fontes, ao tomar os rotacionais das Leis de Faraday e Ampère-Maxwell, obtêm-se as equações de onda para os campos elétrico e magnético, que leem-se: $(\frac{\mu\epsilon}{c^2}\partial_t^2 - \nabla^2)\vec{E} = 0$ e $(\frac{\mu\epsilon}{c^2}\partial_t^2 - \nabla^2)\vec{B} = 0$. De acordo com estas equações, a teoria de Maxwell previu a existência de ondas eletromagnéticas que, atualmente, sabe-se que viajam no vácuo ($\epsilon_0 = \mu_0 = 1$) à velocidade $c = 29979245800 \text{ cm/s}$ [29]. Tais ondas e algumas de suas propriedades foram detectadas em laboratório pela primeira vez por Heinrich Hertz em 1886, por meio de um aparato para medir ondas de baixa frequência (ondas de rádio). Assumindo os campos na forma de ondas planas, $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$ e $\vec{B} = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$, a relação entre frequência e vetor de onda para propagação num meio contínuo, isotrópico e não dispersivo é $\omega^2 = c^2|\vec{k}|^2/\mu\epsilon$. Ao compararmos esta, com a relação de dispersão de Einstein: $\mathcal{E}^2 = |\vec{p}|^2c^2 + m^2c^4$, interpretamos que ondas eletromagnéticas possuem massa nula (o que está relacionado à interação de alcance muito longo). Tais ondas são uma combinação de campos elétrico e magnético que se propagam pelo espaço, sem a necessidade da existência de um meio material para transportar energia e momento linear. A teoria eletromagnética de Maxwell é bem estabelecida pela grande precisão experimental. Possui uma quantidade enorme de aplicações tecnológicas, por exemplo, os motores, os geradores, os trens maglevs, a radiotransmissão, os radiotelescópios, os cabos de fibras óticas, o forno micro-ondas entre tantas outras.

Inúmeras propostas tem sido feitas para complementar a teoria de Maxwell em altas e baixas energias acrescentando termos extras na lagrangiana (3.1), visando explicar novos fenômenos como a aparente violação da simetria de Lorentz sob transformação de partícula [50], ou mesmo aparentes violações tanto de Lorentz como CPT [51]. Em ambas as situações termos extras propostos acoplam campos elétricos e magnéticos. Em FMC, vários modelos já conhecidos da Física de Partículas e Campos podem ser reestudados

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

clarificando interpretações e fazendo previsões por meio de descrições efetivas. Uma destas descrições é a densidade lagrangiana efetiva para fenômenos eletromagnéticos em baixas energias envolvendo IT's, que lê-se:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{Maxwell} + \mathcal{L}_\theta = -\frac{1}{8\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} A_\mu J^\mu + \underbrace{\frac{\alpha\theta}{16\pi^2} F^{\mu\nu} \tilde{F}_{\mu\nu}}_{\text{termo axiônico}}. \quad (3.7)$$

O terceiro termo acrescentado à lagrangiana de Maxwell é oriundo da eletrodinâmica axial que, por sua vez, veio da Física de Partículas, aparecendo originalmente na teoria de Peccei-Quinn em uma tentativa de resolver o problema CP forte³. No contexto de baixas energias, como modelo efetivo que é de interesse neste trabalho, este termo apresenta um campo do tipo axiônico, θ , não dinâmico, de natureza topológica, amplamente utilizado na literatura para a descrição de IT's [19]. Este termo extra nos dá uma função de partição, $e^{iS_\theta/\hbar}$, que está relacionada ao termo extra na ação da eletrodinâmica Maxwell:

$$S_\theta = \int d^4x \mathcal{L}_\theta = \int d^4x \left(\frac{\alpha\theta}{4\pi^2} \vec{E} \cdot \vec{B} \right). \quad (3.8)$$

Esta quantidade é sempre um múltiplo inteiro n de θ quando integrada sobre todo espaço-tempo, $iS_\theta/\hbar = n\theta$. A teoria é invariante se fizermos a mudança $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$. A existência do campo θ é responsável pela descrição de propriedades topológicas macroscópicas e mensuráveis em IT's 3D. Deslocar o ângulo de áxion por 2π significa acrescentar estados de superfície com condutância Hall quantizada. Sob reversão temporal, este campo é ímpar, ou seja, $\theta \xrightarrow{\mathcal{T}} -\theta$, e a lagrangiana (3.7) permite um valor não trivial de θ , sendo um múltiplo inteiro ímpar de π , que permite a descrição dos IT's. A validade deste modelo

³Para explicar a ausência da violação da simetria discreta CP nas interações interquarks da cromodinâmica quântica, Peccei e Quin sugeriram que uma nova simetria contínua estaria presente. A quebra desta simetria implicaria no surgimento do campo de áxion, proposto posteriormente por Weinberg e Wilczec. A primeira proposta de acrescentar um campo pseudo-escalar à eletrodinâmica foi feito por Ni por volta de 1974, sendo este o precursor de um protótipo axiônico [32]

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

necessita de uma abertura do *gap* de energia na superfície do IT, para que os cones de Dirac sejam separados, o que pode ser feito com a deposição de um filme ferromagnético sobre a superfície, como é discutido na seção seguinte. As equações de Maxwell advindas da lagrangiana (3.7) mantêm a sua forma, como em (3.3 - 3.6), mas as propriedades dos materiais podem modificar as relações constitutivas entre deslocamento elétrico \vec{D} e campo magnetizante \vec{H} . Em IT's de modo geral, os campos e as polarizações dos meios são consistentemente descritos por:

$$\begin{cases} \vec{D} = \epsilon\vec{E} + 4\pi\vec{P} \pm \frac{\alpha\theta}{\pi}\vec{B} \\ \vec{H} = \frac{1}{\mu}\vec{B} - 4\pi\vec{M} \mp \frac{\alpha\theta}{\pi}\vec{E}. \end{cases} \quad (3.9)$$

Os sinais \pm são determinados de acordo com a escolha do sentido da magnetização na superfície do IT. \vec{P} é chamado de polarização elétrica, que é o momento de dipolo médio resultante por unidade de volume devido à resposta do meio à ação de um campo elétrico. Como átomos e moléculas de isolantes possuem uma nuvem eletrônica polarizável, são criados momentos de dipolo microscópicos, responsáveis pelas cargas ligadas, $\sigma_b = \hat{n} \cdot \vec{P}$, onde \hat{n} é um vetor normal à superfície do material. Já o vetor \vec{M} é a densidade de momento de dipolo magnético ou magnetização, que é a resposta microscópica relacionada a um alinhamento de domínios magnéticos devido a um campo magnético externo. Este termo está relacionado às densidades de correntes ligadas, $\vec{J}_b = \vec{\nabla} \times \vec{M}$. Por outro lado, as relações (3.9) apresentam termos extras dependentes do parâmetro θ e da constante de estrutura fina α , acoplando \vec{E} e \vec{B} . Com esta dependência entre os campos, o material exibe uma resposta bastante diferente das cargas e correntes ligadas relacionadas a \vec{P} e \vec{M} , ocorrendo a indução de densidades de cargas e correntes livres na superfície (e também em uma pequena região do *bulk*) relacionadas ao efeito Hall. Estas densidades, ρ_H e \vec{J}_H , funcionam efetivamente como termos de fontes nas equações de Maxwell, sendo que sua existência é independente das fontes usuais ρ e \vec{J} . Por consequência, ocorrem fenômenos peculiares, tais como o efeito magneto-elétrico topológico descrito na Figura 1.3 e as rotações de Faraday e Kerr em IT's, que serão discutidas no capítulo seguinte.

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

Se desconsiderarmos as polarizações do meio os campos podem ser escritos na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \vec{D} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon & \pm\alpha \\ \mp\alpha & 1/\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{B} \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

Tal forma se parece com a descrição para meios anisotrópicos e mostram que, por meio de medidas dos campos elétricos e magnéticos, a constante estrutura fina α , pode ser determinada precisamente. Em IT's 3D, o efeito magnetoelétrico topológico é quantizado em termos da constante α . Medidas da condutância Hall quantizada também figuram múltiplos desta constante. Com base nesta última, tem sido feitas propostas para novas definições metrológicas, como na referência [33]. Neste meio não-dispersivo, ou seja, quando a respostas do meio não depende da frequência do campo eletromagnético da onda incidente, Abraham e Minkowski em suas abordagens concordam que uma onda eletromagnética tem densidade de energia $\frac{1}{2}\vec{D} \cdot \vec{E} + \frac{1}{2}\vec{H} \cdot \vec{B}$ e fluxo de energia $\frac{4\pi}{c}\vec{E} \times \vec{H}$. Todavia, as expressões para o momento linear são distintas para estes autores, sendo que para Minkowski

$$\vec{p}_M = \vec{D} \times \vec{B}, \quad (3.11)$$

e para Abraham,

$$\vec{p}_A = \vec{E} \times \vec{H}. \quad (3.12)$$

Como consequência desta diferença, podemos verificar que o módulo da razão entre a densidade de energia e a densidade de momento é para Minkowski é $1/nc$, enquanto que para Abraham é n/c , sendo n o índice de refração do meio. Então, quando uma onda eletromagnética, que no vácuo tem momento $\hbar\omega$, entra num meio material, terá momento dado por $\hbar\omega/nc$ segundo Abraham, e $n\hbar\omega/c$ segundo Minkowski [52]. Como o índice de refração depende das constantes do meio $n = \sqrt{\mu\epsilon}$, e alguns IT's 3D tem valor consideravelmente grande de permissividade, por exemplo, $\epsilon \approx 100$ para o Bi_2Se_3 , é

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

possível que haja grandes discrepâncias nas duas descrições. Em princípio parece simples afirmar que um dos dois está errado, contudo, Penfield e Hauss afirmaram (para isolantes triviais) que nenhuma das duas propostas é completamente correta, nem completamente incorreta [53], pois a descrição do momento é sempre acompanhada de uma parte do momento do material. Como a parte material tem diferentes formas para as diferentes formulações para meios materiais, ao considerá-la, segundo estes autores, há concordância de ambos os casos com os dados experimentais. Contudo, na medida que novos materiais são previstos ou descobertos, tenta-se descrever o momento da onda no meio e entender o momento do material por uma formulação ou por outra, e a controvérsia é sempre ressuscitada.

3.2 Comparação entre Eletrodinâmica Tipo-Axiônica e Eletrodinâmica CPT-Par com Violação de Lorentz

Grandes esforços teóricos tem sido feitos nas últimas décadas investigando as chamadas extensões do MP das partículas elementares. Este, por sua vez descreve muito bem todas as partículas fundamentais que compõem a matéria e as suas interações (exceto a gravitacional). Sua extensão proposta nas últimas décadas, o Modelo Padrão Estendido (MPE) possui as mesmas propriedades do MP, como conservação da energia e momento, microcausalidade, renormalizabilidade por contagem de potências e outras [54], exceto que a simetrias de Lorentz pode ser violada sob uma transformação ativa de Lorentz (transformação de partícula) [55], que se deve à suposta existência de campos tensoriais de fundo não-dinâmicos, remanescentes de propostas de teorias “mais fundamentais”, como a hipótese de cordas, por exemplo [56, 57]. Estes campos não alteram as transformações de Lorentz passivas (transformações de observador) [50].

Por meio do setor de radiação (ou setor de calibre) do MPE podemos mostrar similaridades com o modelo axiônico da seção anterior. A lagrangiana de nosso interesse

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

para comparação possui um termo CPT-par além do modelo de Maxwell (sem fontes), que em unidades naturais ⁴, lê-se:

$$\mathcal{L}_{total} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{4}(k_F)_{\kappa\lambda\mu\nu}F^{\kappa\lambda}F^{\mu\nu}, \quad (3.13)$$

onde $(k_F)_{\kappa\lambda\mu\nu}$ é um objeto tensorial de rank 4 que é adimensional e pode ser escrito como um conjunto de constantes acoplando o tensor eletromagnético $F^{\mu\nu}$ a ele mesmo como um tipo de correção ao termo cinético usual, $\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. Este objeto possui as simetrias do tensor de curvatura de Riemann, que leem-se:

$$(k_F)^{\mu\nu\alpha\beta} = (k_F)^{\alpha\beta\mu\nu} = -(k_F)^{\nu\mu\alpha\beta} = (k_F)^{\nu\mu\beta\alpha}, \quad (3.14)$$

além disso, obedece a identidade de Bianchi para tensores de rank 4:

$$(k_F)^{\mu\nu\alpha\beta} + (k_F)^{\mu\beta\nu\alpha} + (k_F)^{\mu\alpha\beta\nu} = 0, \quad (3.15)$$

seu duplo-traço é nulo, $(k_F)_{\mu\nu}{}^{\mu\nu} = 0$, desta forma, do total das 256 componentes que o constituem, apenas 19 são linearmente independentes [58]. Muitos testes experimentais precisos tem sido feitos para impor limites para a ordem de grandeza dos parâmetros associados a suas componentes, sendo que as melhores estimativas, obtidas de medidas cosmológicas de birrefringência da luz impõem: $|(k_{AF})^{\mu\nu\alpha\beta}| \leq 10^{-32}$ [59].

A equação de movimento advinda da lagrangiana para este modelo é::

$$\partial_\alpha F_\mu^\alpha + (k_F)_{\mu\alpha\beta\gamma} \partial^\alpha F^{\beta\gamma} = 0, \quad (3.16)$$

com a identidade de Bianchi,

$$\partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = 0, \quad (3.17)$$

⁴Neste seção usamos unidades naturais para que a forma das equações das referências seja mantida. Os campos \vec{E} , \vec{B} , \vec{D} e \vec{H} , que são apresentados e comparados em ambos modelos, possuem a mesma dimensão tanto no sistema gaussiano como no sistema natural de unidades.

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

formam as equações de Maxwell modificadas pelo tensor de fundo. Devido ao valor minúsculo das propostas de correções, as violações de Lorentz seriam extremamente difíceis de serem detectadas [60].

O tensor energia-momento deste modelo tem suas componentes $\Theta^{0j} \neq \Theta^{j0}$ em razão do termo $-(k_F)^{\alpha\beta\mu\gamma} F_\gamma^\nu F_\beta^\alpha$. A componente Θ^{0j} tem a contribuição de 18 componentes do objeto tensorial de fundo vindas de $-(k_F)^{\alpha\beta\mu\gamma} F_\gamma^\nu F_\beta^\alpha$ que não aparecem no modelo usual de Maxwell. Já Θ^{j0} apresenta 6 componentes diferentes do usual também vindas do mesmo termo. Esta diferença traz o acoplamento entre os campos elétrico e magnético. Se estivéssemos considerando o modelo completo, apareceriam também os acoplamentos das componentes do campo elétrico com ele mesmo. Mesmo neste caso particular, Θ^{0j} pode ser associado ao vetor de Poynting generalizado [61].

Em termos dos campos elétrico \vec{E} e magnético \vec{B} a lagrangiana 3.13, é escrita como:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 - \vec{B}^2) + \frac{\alpha}{2}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2) + \frac{1}{2}\beta_E^{jk} E_j E_k + \frac{1}{2}\beta_B^{jk} B_j B_k + \frac{1}{2}\beta_{EB}^{jk} E_j B_k, \quad (3.18)$$

sendo que os três últimos termos possuem traço nulo. É sabido que o campo elétrico é ímpar sob paridade e o campo magnético é par. Então, as partes do tensor de fundo podem ser agrupadas de acordo com a maneira que se transformam para que os termos somados tenham a mesma paridade, pois a ação do modelo, $\mathcal{S} = \int d^4x \mathcal{L}$, deve ser par sob reversão espacial. Assim as componentes do tensor são separadas em setores pares e ímpares sob esta transformação sendo possível identificar as matrizes que acoplam os campos [59,61]. Usando a representação da referência [62], estas matrizes podem redefinir os campos \vec{E} e \vec{B} que aparecem nas equações de Maxwell modificadas como uma espécie de meio homogêneo anisotrópico não dispersivo, definido por uma matriz que relaciona estes últimos aos campos \vec{D} e \vec{H} :

$$\begin{pmatrix} \vec{D} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \kappa_{DE} & \kappa_{DB} \\ \kappa_{HE} & 1 + \kappa_{HB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{B} \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

sendo

$$\begin{aligned}
 (\kappa_{DE})^{jk} &= -2(k_F)^{0j0k}, \\
 (\kappa_{HB})^{jk} &= \frac{1}{2}\epsilon^{j pq}\epsilon^{k rs}(k_F)^{pqrs}, \\
 (\kappa_{DB})^{jk} &= -(\kappa_{HE})^{kj} = (k_F)^{0j pq}\epsilon^{kpq},
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

As matrizes κ_{DE} e κ_{DB} contém juntas 11 elementos e as matrizes κ_{DB} e κ_{HE} somam juntas 8 elementos de modo que temos as 19 componentes LI do tensor $k^{\mu\nu\alpha\beta}$. De posse destas informações podemos relacionar as componentes dos vetores deslocamento elétrico efetivo \vec{D} e o campo magnético efetivo \vec{H} , que tem grande semelhança com as equações da matriz (3.10) para IT's:

$$D^j = E^j - 2(k_F)^{0j0k} E^k + (k_F)^{0jkl} \epsilon^{klm} B^m, \tag{3.21}$$

$$H^j = B^j + \frac{1}{2}(k_F)^{pqrs} \epsilon^{pqj} \epsilon^{rsk} B^k - (k_F)^{0mkl} \epsilon^{jkl} E^m, \tag{3.22}$$

estas equações reproduzem as equações de Maxwell num vácuo que se comporta como um meio material parecido com um IT sem fontes, ou seja sem cargas e correntes Hall:

$$\left. \begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= 0 \\
 \vec{\nabla} \times \vec{H} - \partial_t \vec{D} &= 0 \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} + \partial_t \vec{B} &= 0
 \end{aligned} \right\}, \tag{3.23}$$

Vemos nesta última equação uma grande semelhança com os campos em IT's, contudo uma onda eletromagnética neste meio apresenta uma série de propriedades exóticas conforme nosso artigo que propõe testes para este modelo [63]. Termos extras do tensor energia momento, por exemplo, não permitem que $T^{\mu\nu}$ seja simetrizado, sendo que suas componentes $\Theta^{0j} \neq \Theta^{j0}$ dificultam a associação entre a densidade de momento e vetor

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

de Poynting da forma usual em que $\Theta^{0j} = \Theta^{j0}$ [50, 63]. Então, definir o momento da onda eletromagnética num meio material exige que se faça hipóteses sobre a forma de tal meio. Particularmente neste modelo Lorentz ímpar, não se pode verificar com facilidade as diferenças nas expressões entre as componentes do tensor e as formas de Abraham e Minkowski, pois os termos diferentes seriam minúsculos.

Curiosamente, este modelo Lorentz-ímpar é uma das propostas de estudo de vínculos entre parâmetros cosmológicos para mostrar a variação da constante de estrutura fina α [64]. Então, temos dois modelos com acoplamento magnetoelétrico, onde um deles pretende mostrar que α varia, e outro que esta não varia. Obviamente, a natureza e as propostas dos modelos são muito distintas e ambas são teorias efetivas com grandes limitações, não permitindo testes iguais para ambas, ou julgamentos imediatistas com base nesta comparação.

3.3 Conclusões Preliminares e Perspectivas

Por meio do estudo de termos extras acrescentados á lagrangiana de Maxwell apresentamos brevemente, revisamos e comparamos propriedades básicas dos modelos: eletrodinâmica axiônica efetiva para descrição de IT's e eletrodinâmica CPT-par Lorentz-ímpar do Modelo Padrão Estendido. Diferentes maneiras de escrever os campos usando matrizes permitiram que um modelo fosse comparado a outro, ainda que o primeiro não descreva um meio material, mas um vácuo anisotrópico. A descrição do momento do campo eletromagnético em IT's segundo as expressões de Abraham e Mikowski é controversa, mas mensurável, pois IT's como o Bi_2Se_3 apresentam índices de refração grandes [65]. Já no modelo Lorentz ímpar termos extras nas componentes do tensor energia momento dão contribuições muito pequenas ao fluxo de densidade de momento, e também as expressões de Abraham e de Minkowski calculadas pelas matrizes dos campo \vec{D} e \vec{H} teriam diferenças minúsculas, mas que criam alguma possibilidade para sua existência.

O modelo Lorentz-ímpar é uma das propostas de estudo de vínculos entre parâmetros cosmológicos para mostrar a variação da constante de estrutura fina α , enquanto o

3. O Acoplamento Magnetoelétrico: Ondas Eletromagnéticas em Meios

modelo axiônico é utilizado em FMC para calibração do valor desta constante. A natureza e as propostas dos modelos é bastante distinta, mas mostramos algumas similaridades relevantes.

Capítulo 4

Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

Neste capítulo apresentamos uma solução de um problema de eletrodinâmica, cujas equações de Maxwell são advindas de um modelo efetivo para a descrição de fenômenos eletromagnéticos em IT's em que os campos elétricos e magnéticos aparecem acoplados. Tal modelo é conhecido como eletrodinâmica axiônica para descrição efetiva de IT's em baixas energias. A ideia básica é descrever a penetração de campos e correntes por meio do estudo do confinamento da radiação em um guia de onda de seção transversal retangular com paredes de IT's, que poderiam ser, por exemplo, de Se_2Bi_3 ou de Te_2Bi_3 que são IT's tridimensionais. A penetração no *bulk* do material foi descrita por distribuições propostas para modelar cargas e correntes de acordo com resultados experimentais e cálculos *ab initio* disponíveis na literatura. Estas propostas são ideias originais desta tese. Mostramos que as propriedades das paredes do guia de onda de IT's são distintas dos condutores usuais, e principalmente dos condutores perfeitos.

4.1 Proposta de Densidades de Carga e Corrente para a Eletrodinâmica de Áxion para Isolantes Topológicos

Em geral problemas de eletromagnetismo em IT's são tratados de acordo com as equações de Maxwell advindas do conjunto (3.3 - 3.6) com campos definidos pelas equações (3.9). Por simplicidade, a polarização elétrica \vec{P} e a magnetização \vec{M} serão desprezadas, além disto, consideraremos a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética como constantes, independentes de coordenadas espaciais e do tempo ¹. Uma vez que a carga é conservada na camada superficial de um IT, na presença de um campo elétrico, esta mesma suporta uma densidade superficial de carga Hall σ_H e uma densidade de corrente Hall (por unidade de comprimento) \vec{K}_H , relacionadas por:

$$\partial_t \sigma_H = -\vec{\nabla} \cdot \vec{K}_H = \pm \frac{e^2 \theta}{2\pi \hbar c} \hat{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{E} = \mp \frac{e^2 \theta}{2\pi \hbar c} \hat{n} \cdot \partial_t \vec{B}, \quad (4.1)$$

por conseguinte, $\sigma_H = \mp \frac{e^2 \theta}{2\pi \hbar c} \hat{n} \cdot \vec{B}$, ou em termos da constante de estrutura fina, $\sigma_H = \mp \frac{\alpha \theta}{\pi} (\hat{n} \cdot \vec{B})$. Por meio destas relações, a densidade volumétrica de carga Hall é $\rho_H = \mp \frac{\alpha \theta}{\pi} (\hat{n} \cdot \vec{B}) \delta(r_n)$ e a densidade de corrente Hall é $\vec{J}_H = \pm \frac{\alpha \theta}{\pi} (\hat{n} \times \vec{E}) \delta(r_n)$. Consistentemente, as leis de Gauss e de Ampère-Maxwell apresentam modificações de natureza topológica, e em termos dos campos elétricos e magnéticos se tornam:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \mp \frac{\alpha \theta}{\pi} \delta(r_n) \hat{n} \cdot \vec{B}, \quad (4.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \partial_t \vec{E} = \mp \frac{\alpha \theta \mu}{\pi} \delta(r_n) \hat{n} \times \vec{E}. \quad (4.3)$$

¹As relações constitutivas que apresentamos são casos com resposta linear, porém há casos, em isolantes comuns, onde o campo resposta aparece em potências. Além disso, em última análise, respostas de qualquer meio material não são instantâneas, isto é, apresentam uma resposta não local no tempo (um "atraso"), que visto sob o espectro de Fourier das constantes do meio, mostram dependência com a frequência. Estes meios temporalmente dispersivos obedecem a relação de Kramers-Kronig, que são condições para que um sistema seja causal. Existem também meios com dispersão espacial (não localidade espacial). Para detalhes veja a referência [66].

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

Nomeamos r_n como uma coordenada na direção do vetor \hat{n} que é normal à superfície do IT. A distribuição delta de Dirac restringe a movimentação de cargas e correntes à superfície perfeitamente bidimensional perpendicular à r_n . Estas equações são bastante comuns no tratamento usual de problemas de eletromagnetismo em IT's 3D [18, 19, 34].

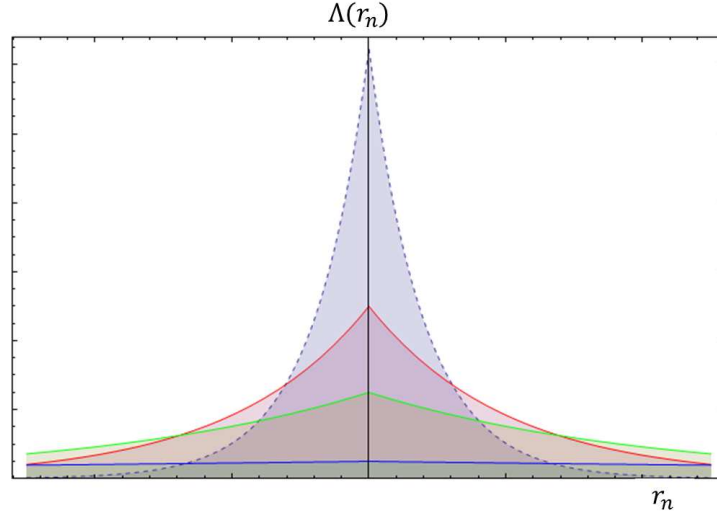


Figura 4.1: Esboço da distribuição que substituímos no lugar da delta de Dirac para estender as cargas e correntes ao *bulk* do material. As unidades são arbitrárias e a linha pontilhada representa um comprimento relacionado à maior atenuação, que é de nosso interesse, a linha vermelha, a segunda maior e assim por diante até a atenuação quase nula, que seria a linha azul representando um valor aproximadamente constante. Para nossos fins essa distribuição será ‘partida ao meio’ e seu comportamento será tomado como decaimento exponencial a partir de seu valor máximo que estaria associado à superfície do IT. As soluções que obtemos serão, por esta razão, divididas por regiões.

Para investigar efeitos de correntes que penetram no *bulk* do material e os efeitos dentro de uma faixa finita de tamanho, apresentamos nesta tese uma proposta de aproximação para descrever a densidade de carga e de corrente Hall como seguem:

$$\rho_H = \pm \frac{\alpha\theta}{4\pi l} e^{-\frac{|r_n|}{2l}} \hat{n} \cdot \vec{B}, \quad (4.4)$$

$$\vec{J}_H = \mp \frac{\alpha\theta\mu}{4\pi l} (\hat{n} \times \vec{E}) e^{-\frac{|r_n|}{2l}}, \quad (4.5)$$

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

em que substituímos a distribuição delta de Dirac por uma aproximação, $\delta(r_n) \approx \frac{1}{2\xi} e^{-\frac{|r_n|}{\xi}}$, que é um pulso exponencial que se estende em uma espessura ξ (largura da distribuição) na direção $\vec{r}_n = r_n \hat{n}$, perpendicular à superfície do IT que será definida posteriormente de acordo com o sistema de coordenadas conveniente a cada problema. Tomamos o comprimento de penetração de estados de borda como a metade de ξ , que é a largura da distribuição, ou seja, $\xi = 2l$, conforme se observa na figura 4.1, uma vez que nossa descrição deve garantir que exatamente na superfície o valor da distribuição deve ser máximo e deve diminuir com a penetração no *bulk*. Com esta ideia, daremos um tratamento mais realista aos IT's, considerando que densidades de cargas e correntes penetram uma pequena distância l , associada a planos atômicos através do *bulk*. Se considerássemos uma superfície de espessura infinitesimal ou de largura desprezível perderíamos informações físicas importantes sobre o comportamento nesta pequena região. Fazendo as densidades de carga e corrente variarem exponencialmente com o comprimento l podemos manipulá-las para aumentar ou diminuir a dissipação. De forma parecida ao capítulo anterior, nesta proposta, o *bulk* não é perfeitamente isolante, podendo ser um condutor ruim ou um semiconductor. Tomando o limite em que a espessura se torna infinitesimal, $l \rightarrow 0$, nas equações de Maxwell, as formas conhecidas de ρ_H e \vec{J}_H para a superfície de um IT são recuperadas². Nosso foco com esta proposta é descrever fisicamente ondas eletromagnéticas cuja propagação atenuada sofre efeitos associados à resposta do material, que são cargas e correntes induzidas em um volume, não apenas restritos à superfície.

²Há muitas formas de aproximar a distribuição delta de Dirac, como a lorentziana: $\delta(x) \approx \lim_{a \rightarrow 0} \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)}$ e o pulso gaussiano, $\delta(x) \approx \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/2\eta}}{\sqrt{2\pi\eta}}$. Optamos pelo pulso exponencial, $\delta(x) \approx \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{e^{-|x|/\xi}}{2\xi}$, por levar a um decaimento exponencial das densidades de carga e corrente Hall mais facilmente tratável nas equações de Maxwell. Além disto, esta distribuição possui expansão em série e derivadas mais simples. Mais detalhes sobre distribuições Delta podem ser vistos na referência [67]

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

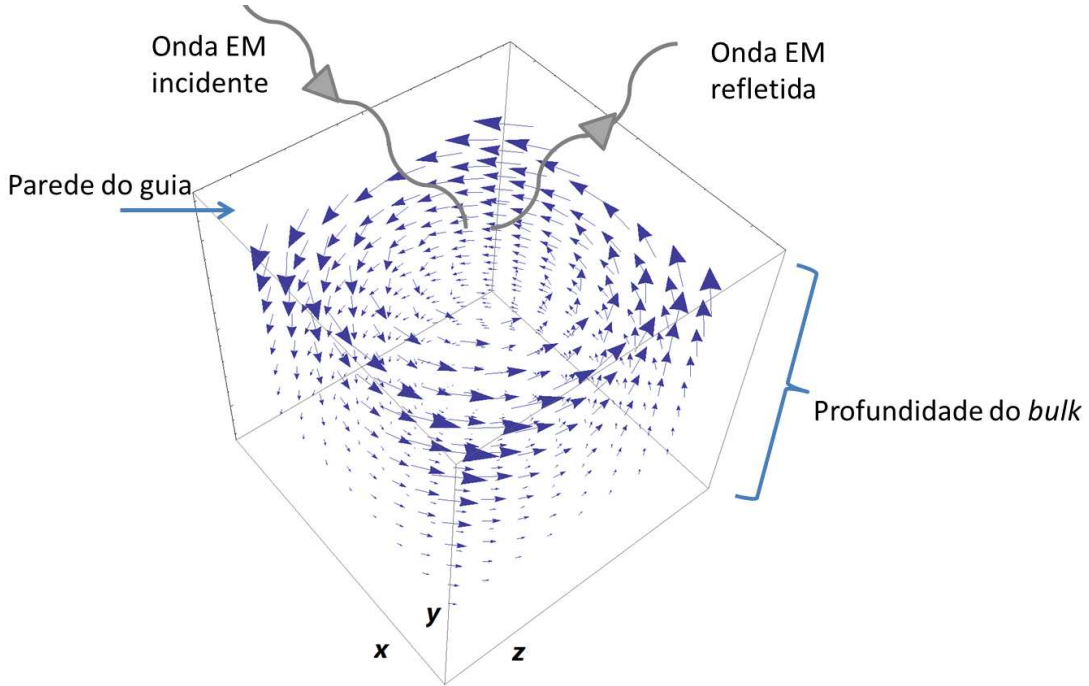


Figura 4.2: Esboço artístico mostrando a atenuação da densidade de corrente Hall induzida na superfície de um IT 3D devido a incidência de uma onda eletromagnética. Nossa proposta se diferencia das usuais por possibilitar valores da corrente através do *bulk*. Uma parte da onda incidente entrará no material gerando movimentação de cargas além da superfície. Embora se visualize o comportamento exponencial na direção y , os tamanhos dos vetores não obedecem as soluções reais obtidas. Esta figura tem apenas caráter didático.

4.2 O Guia de Onda Retangular com Paredes de Isolantes Topológicos

Ao incidir ondas eletromagnéticas em uma superfície feita de algum IT 3D (Bi_2Se_3 ou Bi_2S_3 , por exemplo), o material exibe como resposta, correntes estacionárias nesta superfície como consequência do acoplamento entre os campos elétrico e magnético de acordo com o modelo efetivo (3.7). É sabido que, quanto maior a condutividade superficial σ , menor o comprimento de penetração da radiação no meio condutor [29–31]. Nos metais comuns, correntes que aparecem nas superfícies permitem uma parte complexa no vetor de onda habilitando ondas evanescentes que diminuem a amplitude, energia, momento e potência da onda refletida. Em um IT, com condutividade finita, aparecem também

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

correntes Hall quantizadas descritas no Capítulo 1, devido aos estados de superfície do material.

O efeito Kerr magneto-ótico se manifesta em uma superfície onde ondas eletromagnéticas são refletidas tendo sua base de polarização modificada devido à transferência de momento angular. Recentemente, foi demonstrado que o ângulo de Kerr é grande, $\beta_K \approx \pi/2$, para baixas frequências, $\omega \ll \mathcal{E}/\hbar$, em que \mathcal{E} é a energia do *gap*. O ângulo de Kerr, é um deslocamento angular na polarização elétrica do feixe refletido em um filme fino de IT. A rotação de Faraday é um efeito parecido, contudo, a mudança na base de polarização acontece no feixe refratado. Os ângulos modificadas no efeito Kerr e Faraday são definidos, respectivamente, pelos argumentos dos campos elétricos: $\beta_K = \frac{1}{2}(\arg\{E_+^r\} - \arg\{E_-^r\})$, $\beta_F = \frac{1}{2}(\arg\{E_+^t\} - \arg\{E_-^t\})$. Onde os sinais subscritos representam polarização (helicidade) positiva ou negativa. Os índices r e t indicam feixe refletido e transmitido respectivamente. Ao confinar ondas eletromagnéticas entre superfícies de IT's, ambos os fenômenos, efeito Kerr e Faraday podem acontecer, dependendo da frequência da onda incidente [36].

Os guias de ondas eletromagnéticas usuais são tubos metálicos ocios ou preenchidos com material dielétrico com uma geometria que permita o confinamento e transporte de ondas eletromagnéticas. Em um guia de onda retangular, as ondas eletromagnéticas se propagam em seu interior atravessando seções transversais retangulares que escolhemos como parte do plano xy . Escolhemos a direção z para o transporte destas ondas e assumiremos que o comprimento do guia seja infinito nesta direção, de modo que não haja efeitos de borda. As fronteiras do guia em coordenadas cartesianas são os planos: $x = 0$, $x = a$ e $y = 0$, $y = b$, onde as ondas são refletidas conforme a Figura 4.3.

Um guia de onda ideal seria feito de paredes metálicas perfeitamente condutoras ($\sigma = \infty$) não apresentando correntes superficiais, trazendo simplificações nas equações de Maxwell e nas condições de contorno. Tal guia é comumente tratado em livros de eletromagnetismo clássico e alguns resultados para este caso são tratados no Apêndice B. Propomos um guia de onda retangular de paredes feitas de IT que pode ser construído

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

utilizando, por exemplo, o telureto de bismuto (Bi_2Te_3), o telureto de antimônio (Sb_2Te_3), ou o seleneto de bismuto (Bi_2Se_3), tomaremos este último como o material das paredes do guia de onda de nossa proposta, pois há uma série de resultados via cálculos *ab initio* nas referências [65, 68] que estimam valores para o comprimento de penetração por camadas quintuplas de átomos deste material. O Bi_2Se_3 é um cristal formado pelo empilhamento de blocos compactos de três camadas atômicas de selênio intercaladas com duas de bismuto. As ligações interatômicas são mais frágeis nesse intervalo entre blocos de cinco átomos. Tal material possui uma vantagem, pois permanece um IT na presença do oxigênio que poderia ser o meio dielétrico no interior do guia de onda, garantindo que a permissividade elétrica e permeabilidade magnética seriam próximas do vácuo, trazendo mais simplicidade para sua possível construção.

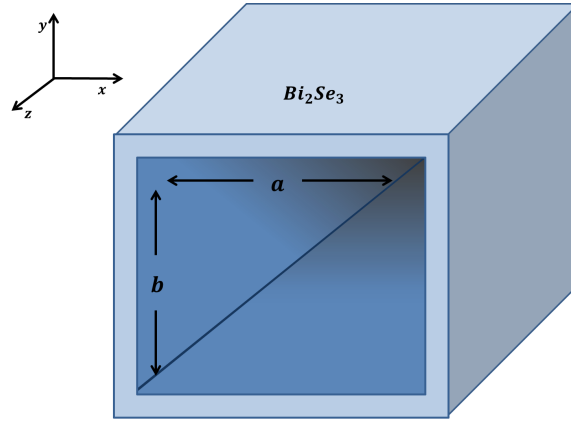


Figura 4.3: Guia de onda retangular de comprimento infinito na direção z . A seção transversal possui dimensões a e b ao longo de x e y , respectivamente. As distribuições de carga e corrente terão a direção de penetração (que foi definida anteriormente como r_n) paralela ao eixo x ou y e perpendiculares a cada parede. As direções estão detalhadas na tabela 4.1.

As Leis de Gauss e Ampère-Maxwell são as que figuram o parâmetro topológico θ entre as equações de Maxwell. Em coordenadas cartesianas, tais equações lêem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = -\frac{1}{\mu}(\hat{n} \cdot \vec{B})\Lambda(x, y), \quad (4.6)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{\mu\epsilon}{c}\partial_t \vec{E} = (\hat{n} \times \vec{E})\Lambda(x, y), \quad (4.7)$$

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

sendo \hat{n} é um vetor normal que assume uma direção e um sentido de acordo com as paredes do guia de onda mostradas na figura 4.4. As densidade de carga e corrente Hall para uma destas paredes são: $\rho_H = -\frac{\Lambda}{\mu}(\hat{n} \cdot \vec{B})$ e $\vec{J}_H = \Lambda(\hat{n} \times \vec{E})$ onde definimos de forma conveniente para este problema a distribuição $\Lambda(x, y)$ que permite a densidade de carga e de corrente Hall adentrar perpendicularmente através das paredes do guia atenuando-as, como consequência das formas propostas nas equações (4.4) e (4.5). Para cada parede do guia de onda, a forma de $\Lambda(x, y)$ pode ser vista na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Tabela com informações básicas para se entender as distribuições de carga e corrente no guia de onda retangular. Na primeira coluna temos os planos correspondentes a cada parede do guia, na segunda figuram as direções de penetração no *bulk* (profundidade), na coluna seguinte estão os vetores unitários \hat{n} com os sinais escolhidos de acordo com o sentido da magnetização e a última coluna traz a distribuição $\Lambda(x, y)$ que determina o comportamento exponencial decrescente de densidades de cargas e correntes induzidas em cada parede, com seus respectivos sinais.

Plano	Profundidade r_n	Vetor normal \hat{n}	$\frac{4\pi l}{\alpha\theta\mu}\Lambda(x, y)$
yz	$x \leq 0$	\hat{x}	$e^{x/2l}$
yz	$x \geq a$	$-\hat{x}$	$-e^{-(x-a)/2l}$
xz	$y \leq 0$	\hat{y}	$e^{y/2l}$
xz	$y \geq b$	$-\hat{y}$	$-e^{-(y-b)/2l}$

Tomando o rotacional das leis de Faraday (3.6) e Ampère Maxwell (4.7), obtemos as equações de onda inhomogêneas:

$$\square \vec{E} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \frac{1}{c} \partial_t [(\hat{n} \times \vec{E})\Lambda(x, y)], \quad (4.8)$$

$$\square \vec{B} = \vec{\nabla} \times [(\vec{n} \times \vec{E})\Lambda(x, y)], \quad (4.9)$$

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

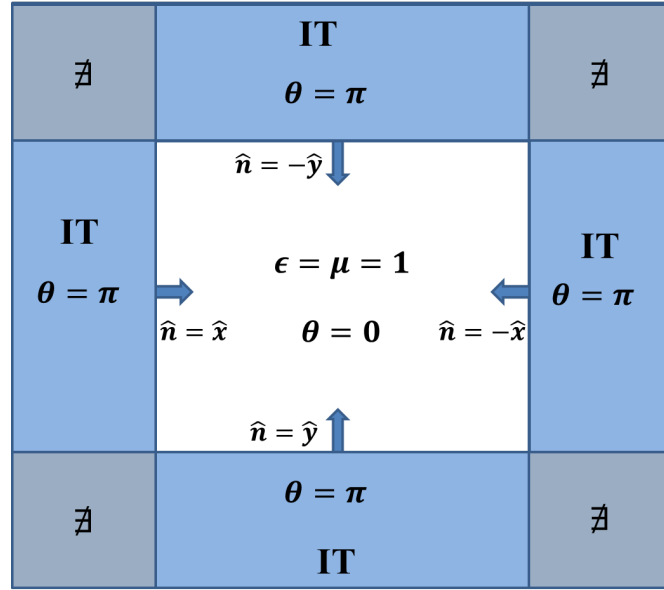


Figura 4.4: Seção transversal do guia de onda retangular. Há basicamente três tipos de regiões identificadas para o problema: a região branca é o interior do guia preenchida por um dielétrico ou o vácuo, em que $\epsilon = \mu = 1$ e $\theta = 0$, a região azul é um IT em que $\theta = \pi$ e as constantes μ e ϵ dependerão do material, particularmente para o Bi_2Se_3 os valores são $\epsilon = 100$ e $\mu = 1$. A região cinza não é descrita pelas equações que determinamos, pois as distribuições propostas para densidade de carga e corrente adentram o IT apenas perpendicularmente, tendo valor máximo na superfície. Conseqüentemente os campos \vec{E} e \vec{B} que obtemos também não tem validade nesta região. Identificamos os vetores unitários em cada parede para resolver o problema por partes. É necessário considerar neste tipo de proposta que cada vetor unitário representa também a direção de um campo magnético aplicado em cada parede de forma independente, onde os efeitos de uma parede não interferem na outra, para que se tenha a abertura do *gap* na superfície do material.

em que $\square = \frac{\mu\epsilon}{c^2}\partial_t^2 - \nabla^2$ é o operador d'Alembertiano. Embora estas equações mantenham a forma usual do eletromagnetismo com fontes, as formas de ρ_H e \vec{J}_H aqui não são usuais. Para obtermos as soluções para os campos \vec{E} e \vec{B} deve-se resolver as equações diferenciais parciais acopladas, cuja solução possui componentes acopladas nas três direções e o método de separação de variáveis não se aplica. Ainda que a primeira equação (4.8) esteja escrita sem a dependência em \vec{B} , é fácil substituir $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \Lambda \hat{n} \cdot \vec{B} / \mu$ e obter uma dependência explícita mostrando o acoplamento e complicando a resolução consistente das duas equações. A segunda equação, apresentada com dependência entre \vec{E} e \vec{B} , poderia ser

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

desacoplada separando as componentes, fazendo recorrentes substituições e aumentando a ordem das derivadas, porém é necessária implementação numérica ou métodos que estão além da nossa proposta para obter uma solução analítica por meio de separação de variáveis. Obteremos os campos de uma outra forma descrita adiante.

Tomando o rotacional da Lei de Gauss (3.3) e novamente da Lei de Ampère-Maxwell (3.4), e identificando as relações: $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\partial_t\vec{A}$ e $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, obtemos as equações de onda para os potenciais escalar elétrico Φ e vetor magnético \vec{A} :

$$\square\Phi = -\frac{1}{\mu\epsilon} (\hat{n} \cdot \vec{B}) \Lambda(x, y), \quad (4.10)$$

$$\square\vec{A} = (\vec{n} \times \vec{E}) \Lambda(x, y). \quad (4.11)$$

Em que a condição de Lorenz³, $\frac{1}{c}\partial_t\Phi - \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, foi utilizada. Esta mesma condição pode ser escrita na forma covariante por meio do 4-potencial (campo de calibre) e lê-se: $\partial_\mu A^\mu = 0$. As equações de onda (4.10) e (4.11) também podem ser escritas desta forma mais compacta, $\square A^\mu = \partial_\nu \partial^\nu A^\mu = \frac{4\pi}{c} J^\mu$. Note que a quantidade $J^\mu = (\rho_H, \vec{J}_H)$ tem a mesma forma daquela nas equações de Maxwell apresentada na seção anterior, a qual, via Teorema de Noether, é uma quantidade conservada, $\frac{1}{c}\partial_t\rho_H - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_H = 0$, ou, $\partial_\mu J^\mu = 0$. A carga e a corrente Hall totais são calculadas de acordo com as respectivas contribuições de cada parede do guia, considerando espessuras infinitas.

Para encontrar os campos ou os potenciais soluções para o guia de onda, devemos levar em conta que as paredes de IT's levam a condições de contorno não triviais para componentes dos campos. As condições advindas das equações Maxwell homogêneas, (3.6) e (3.5), relacionam as soluções no interior do guia (ar ou vácuo) e dentro do IT, estas condições para cada superfície do guia, leem-se:

³A condição de Lorenz, em honra a Ludvig V. Lorenz, erroneamente chamada de condição de Lorentz em várias referências como [29–31], é uma condição de fixação de calibre na eletrodinâmica de Maxwell. A invariância de calibre do modelo nos permite fazer escolhas de calibre que não alteram os campos eletromagnéticos, a condição de Lorenz é uma destas escolhas.

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

$$\begin{cases} \hat{n} \cdot (\vec{B}_{int} - \vec{B}_{IT}) = 0, \\ \hat{n} \times (\vec{E}_{int} - \vec{E}_{IT}) = 0, \end{cases} \quad (4.12)$$

Todavia, existem as condições de contorno não-triviais advindas das equações não-homogêneas:

$$\begin{cases} \hat{n} \cdot \vec{D} = -(\hat{n} \cdot \vec{B})\Lambda, \\ \hat{n} \times \vec{H} = (\hat{n} \times \vec{E})\Lambda. \end{cases} \quad (4.13)$$

Ao invés de resolvermos as equações de onda, encontraremos outras equações a partir de considerações sobre as componentes dos campos nas equações de Maxwell. A solução obtida por componentes separadas, deve necessariamente satisfazer as equações onda também.

Por simplicidade, tomaremos as radiações dentro do guia como linearmente polarizadas e monocromáticas. É razoável supor as formas gerais para os campos no guia retangular, para ondas na direção z ($k = k_z$) do guia como ondas planas:

$$\begin{cases} \vec{E} = \vec{E}_0(x, y)e^{i(kz - \omega t)} \\ \vec{B} = \vec{B}_0(x, y)e^{i(kz - \omega t)}, \end{cases} \quad (4.14)$$

sendo as amplitudes dependentes das componentes, como seguem:

$$\begin{cases} \vec{E}_0(x, y) = (E_x \hat{x} + E_y \hat{y} + E_z \hat{z}) \\ \vec{B}_0(x, y) = (B_x \hat{x} + B_y \hat{y} + B_z \hat{z}), \end{cases} \quad (4.15)$$

Os termos diferentes da eletrodinâmica usual de Maxwell estariam associados às componentes das amplitudes transversais $E_0(x, y)$ e $B_0(x, y)$ que contém os campos transversos à direção do movimento, as componentes axiais e suas derivadas. Modificações devem aparecer explicitamente na relação de dispersão (relação entre ω e k), calculada consistentemente com as equações diferenciais para as componentes axiais E_z e B_z .

Substituindo as soluções tipo ondas planas nas equações de Maxwell modificadas, e por meio de manipulações algébricas, encontramos os campos transversos à direção de propagação em função das derivadas das componentes axiais:

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

$$E_x = \frac{-i}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} (c\omega\Lambda E_z - c\omega\partial_y B_z - c^2k\partial_x E_z), \quad (4.16)$$

$$E_y = \frac{i}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} (c\omega\Lambda E_z + c^2k\partial_y E_z - c\omega\partial_x B_z), \quad (4.17)$$

$$B_x = \frac{i}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} (\mu\epsilon c\omega\partial_x E_z + c^2k\Lambda E_z - c^2k\partial_y B_z), \quad (4.18)$$

$$B_y = \frac{i}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} (-\mu\epsilon c\omega\partial E_z - c^2k\Lambda E_z + c^2k\partial_x B_z), \quad (4.19)$$

Podemos observar que os termos extras devido ao acoplamento axiônico dependem de ω e k , e alteraram a amplitude usual bem como a relação de dispersão. Estes campos devem obedecer as condições de contorno (4.12) e (4.13) em cada parede do guia separadamente, para que se obtenha uma solução com todas as componentes concordantes com o valor das derivadas que aparecem nestes campos. Estas componentes foram substituídas novamente nas equações de Maxwell, resultando em duas equações diferenciais parciais acopladas que dependem apenas das componentes axiais:

$$\nabla_T^2 B_z + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) B_z - \Lambda(\partial_x + \partial_y)E_z - E_z(\partial_x + \partial_y)\Lambda = 0, \quad (4.20)$$

$$\nabla_T^2 E_z + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) E_z + \frac{1}{\mu\epsilon} \left[\frac{ck}{\omega} (\partial_x\Lambda - \partial_y\Lambda) - \Lambda^2 \right] E_z + \frac{2ck\Lambda}{\mu\epsilon\omega} \partial_x E_z + \frac{\Lambda}{\mu\epsilon} (\partial_x + \partial_y) B_z = 0, \quad (4.21)$$

onde $\nabla_T^2 = \nabla^2 - \partial_z^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$ é o operador laplaciano transversal. Estas equações são bastante distintas daquelas para um guia de onda usual, primeiramente por serem acopladas e verifica-se também que há derivadas extras devido à contribuições do parâmetro topológico θ , implícito em Λ . Diferentemente das equações de onda (4.8) e (4.9), temos agora uma equação diferencial parcial tipo-elíptica, separável, sem derivadas cruzadas e que admite um *ansatz* tipo onda plana em que os campos tenham componentes de amplitudes distintas:

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

$$\begin{cases} E_z(x, y) = E_a e^{ik_x x + ik_y y}, \\ B_z(x, y) = B_a e^{ik_x x + ik_y y}, \end{cases} \quad (4.22)$$

onde k_x e k_y são constantes de propagação, as amplitudes E_a e B_a são determinadas pelas condições de contorno (4.12)-(4.13). Estas amplitudes foram substituídas e tomadas como distintas obtendo um sistema de equações polinomiais, cuja solução não trivial leva a uma informação física interessante: a possibilidade de um modo híbrido que não é transverso elétrico (TE) nem transverso magnético (TM), ou seja podemos ter $E_z \neq 0$ e $B_z \neq 0$. Ao mesmo tempo, os modos usuais TE (para apenas $E_z = 0$) e TM (para apenas $B_z = 0$) continuam coexistindo no espaço das soluções. A relação de dispersão geral no modo híbrido obtida de forma consistente por meio de (4.21) e 4.20 lê-se:

$$\left[k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) \right] \left\{ \left[k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) \right] - \frac{1}{\mu\epsilon} \left[\frac{ck}{\omega} (\partial_x \Lambda - \partial_y \Lambda) - \frac{2ickk_x \Lambda}{\omega} - \Lambda^2 \right] \right\} = \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon} (k_x + k_y)^2 - \frac{i\Lambda}{\mu\epsilon} (\partial_x \Lambda + \partial_y \Lambda) (k_x + k_y).$$

Observa-se que é uma equação de quinta ordem para a frequência ω e que há uma dependência espacial que descreve ondas no interior e dentro das paredes do guia de onda. Tomando $\theta = 0$, ou seja, $\Lambda = 0$, temos a dispersão idêntica à usual dentro do guia de onda, mas para um modo híbrido. Esta expressão leva a equações consideravelmente complicadas com muitas raízes. Por simplicidade, algumas propriedades da radiação serão apresentadas apenas nos modos TE e TM, mas relacionaremos com o modo híbrido quando for conveniente. Logo abaixo, apresentamos a frequência de corte, a qual não existe propagação abaixo deste valor:

$$\omega_c = \frac{c}{\mu\epsilon} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 - \frac{\Lambda^2}{2\mu\epsilon} + \sqrt{\frac{\Lambda^4}{\mu^2\epsilon^2} + \frac{4\Lambda^2}{\mu\epsilon} (k_x + k_y)^2}}. \quad (4.23)$$

Esta frequência também obedece as relações usuais no limite de θ nulo e uma vez que

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

as condições de contorno conectam as soluções dentro da parede de IT e no interior do guia, verifica-se que k_x e k_y devem ter as formas usuais garantidas pelas condições de onda estacionária dentro do guia de onda, ou seja $k_x = m\pi/a$ e $k_y = n\pi/b$, em que m e n são números inteiros que não podem ser simultaneamente nulos, pois anulariam os campos. A relação entre k_x , k_y e $k = k_z$, que são componentes do vetor da onda original, se dá via dispersão do modo híbrido. Interpretamos a frequência de corte (4.23) como uma frequência mínima dentro da parede do guia, uma vez que temos uma dependência que só existe no *bulk*, o que é algo incomum. Ao substituímos os valores das constantes na referida equação na superfície do IT onde a onda incide, verificamos que no valor máximo de Λ teremos uma frequência de corte bem acima do valor no interior do guia. Considerando as dimensões do guia: $a = 4\pi \text{ cm}$ e $b = 5\pi \text{ cm}$. Assumindo o comprimento de penetração dos estados de borda com valores $l \sim 1 \text{ nm}$, sendo $\epsilon = 100$ e $\mu = 1$, conforme valores das referências [65, 68], obtemos de uma forma independente, uma frequência de corte de grande valor: $\omega_{bulk} \sim 10^{13} \text{ Hz} > \omega_{int} = 6 \times 10^8 \text{ Hz}$ para este modo híbrido. A referência [69] traz dados experimentais e informações relacionados à condutividade e refletividade ótica de vários materiais que podemos relacionar com as frequências obtidas. Segundo esta fonte, a partir de um valor em torno de $800 \text{ c/cm} \sim 10^{11} \text{ Hz}$, o Bi_2Se_3 diminui consideravelmente sua refletividade, ou seja, permite mais facilmente a propagação de ondas que incidem em sua superfície. Porém, é interessante observar que existe um gigantesco crescimento da condutividade ótica a partir de 10^{13} Hz , concordando o valor que obtivemos nesta tese. Considerando que as dimensões macroscópicas do guia pouco interferem na ordem de grandeza da frequência de corte dentro da parede ($\omega_c \approx ac/4l\epsilon \sim 10^{13} \text{ Hz} \gg 10^8 \text{ Hz}$), os valores obtidos com a abordagem desta tese estão de acordo com o que foi medido.

4.2.1 Modo Transverso Magnético

Investigaremos agora, o modo transverso magnético que permite uma solução mais simples, com $B_z = 0$. As equações diferenciais (4.20) e (4.21) para a componente axial

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

elétrica se tornam:

$$\Lambda(\partial_x + \partial_y)E_z - E_z(\partial_x + \partial_y)\Lambda = 0, \quad (4.24)$$

$$\left(\nabla_T^2 \frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2\right) E_z - \frac{1}{\mu\epsilon} \left[\frac{ck}{\omega}(\partial_x - \partial_y)\Lambda - \Lambda^2\right] E_z + \frac{2ck}{\mu\epsilon\omega} \Lambda \partial_x E_z = 0. \quad (4.25)$$

Substituindo a equação (4.24) em (4.25) temos uma simplificação, que lê-se:

$$\nabla_T^2 E_z + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2\right) E_z - \frac{1}{\mu\epsilon} \left[\frac{ck}{\omega} \Lambda \partial_y + \Lambda^2\right] E_z = 0. \quad (4.26)$$

Esta última, pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis e uma das soluções é análoga à da equação diferencial do oscilador harmônico clássico, ou seja, uma exponencial complexa que pode ser aberta em combinações de senos e cossenos pela fórmula de Euler. Porém manteremos a forma exponencial de uma onda estacionária com uma amplitude, por simplicidade. Mostraremos que esta é a solução e os argumentos físicos que levam a sua escolha. A componente axial do campo magnético, lê-se:

$$E_z(x, y) = E_0^{IT} e^{ik_x x + ik_y y}. \quad (4.27)$$

Por meio da substituição desta solução na equações (4.26), obtemos a relação de dispersão entre ω e k com os termos extras que depende de Λ e conseqüentemente do parâmetro topológico θ :

$$\frac{\mu\epsilon}{c^2} \omega^2 - k^2 - k_x^2 - k_y^2 = -\frac{1}{\mu\epsilon} \left(\frac{ickk_y \Lambda}{\omega} - \Lambda^2\right). \quad (4.28)$$

Esta relação varia espacialmente e devido a dependência em Λ , tal como no modo híbrido, temos ondas que adentram o material, porém esta é bem mais simples por ser uma equação do segundo grau onde as raízes são facilmente encontradas.

Se tomarmos $\Lambda = 0$, obtemos a dispersão para um guia de onda retangular usual⁴.

⁴Veja apêndice B para soluções usuais bem como a dispersão, velocidades de fase e grupo

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

Reunindo todas estas informações e substituindo nas componentes dos campos, (4.16) e (4.17), temos a solução completa para o campo elétrico:

$$\begin{aligned} \vec{E}(x, y, z, t) = E_0^{IT} & \left[\left(\frac{-ic\omega\Lambda - c^2k_xk}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{x} + \left(\frac{c^2k_yk}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{y} \right. \\ & \left. + \left(e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{z} \right] e^{ikz - i\omega t}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

da mesma forma substituindo nas equações para as componentes dos campo magnético, equações (4.18) e (4.19), obtemos:

$$\vec{B}(x, y, z, t) = B_0^{IT} \left[\left(\frac{-c^2k_xk}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{x} + \left(\frac{c^2k_yk}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{y} \right] e^{ikz - i\omega t}. \quad (4.30)$$

Este conjunto de campos oscilantes são as ondas TM que se propagam no interior do guia da forma usual (basta fazer $\theta \rightarrow 0$) e incidem na superfície do IT refletindo uma parte e penetrando no *bulk* quando a frequência é maior que a frequência de corte com dependência espacial ω_c , que lê-se:

$$\omega_{mn}^{TM} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}}. \quad (4.31)$$

Que concordam com a mesma ordem de grandeza das frequências do modo híbrido citadas na seção anterior. A velocidade de fase no meio também é facilmente obtida pela dispersão, e lê-se:

$$v_f^{TM} = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon} \right]}} > c, \quad (4.32)$$

facilmente verifica-se que esta velocidade é supraluminal para qualquer valor não nulo de frequência. v_f não é a velocidade de transporte de energia e sim a taxa com que a fase da onda se desloca no espaço. Se a onda tem o valor da frequência de corte a velocidade

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

de fase é infinita como em um guia usual. A energia das ondas é transportada com a velocidade de grupo, que lê-se:

$$v_g^{TM} = \frac{c}{\mu\epsilon} \sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon} \right]} < c. \quad (4.33)$$

4.2.2 Modo Transverso Elétrico

Neste modo, $E_z = 0$, e as equações diferenciais para a componente axial magnética se tornam:

$$\nabla_T^2 B_z + \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) B_z = 0, \quad (4.34)$$

$$\partial_x B_z + \partial_y B_z = 0. \quad (4.35)$$

Substituindo a equação (4.34) em (4.35), temos a simplificação:

$$\partial_x^2 B_z + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 \right) B_z = 0. \quad (4.36)$$

Tomando o *ansatz* de forma análoga ao modo TM e também ao modo híbrido, temos:

$$B_z = B_0^{IT} e^{ik_x x + ik_y y}, \quad (4.37)$$

Com esta solução, ao substituímos na equação (4.36), temos a dispersão usual:

$$\frac{\mu\epsilon\omega^2}{c^2} - k^2 = k_x^2 + k_y^2. \quad (4.38)$$

Este é um resultado inesperado, uma vez que o modo TE apresentou termos extras devido ao parâmetro topológico θ . Desta forma a única diferença entre ondas TE dentro e fora do guia se deve à permissividade do meio ϵ sendo que no interior $\epsilon = 100$. A permeabilidade μ é tomada igual à unidade tanto no vácuo como no oxigênio e no Se_2Bi_3 . Apesar da forma usual, a amplitude dos campos dentro e fora do condutor em todos os modos são

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

completamente distintas e estão vinculadas pelas condições de contorno e pelas derivadas das componentes axiais.

Obtemos todas as componentes dos campos substituindo nas equações (4.18) e (4.19).

$$\vec{B} = B_0^{IT} \left[\left(\frac{-c^2 k_x k}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2 k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{x} + \left(\frac{c^2 k_y k}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2 k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{y} + \left(e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{z} \right] e^{ikz - i\omega t}. \quad (4.39)$$

e

$$\vec{E}(x, y, z, t) = E_0^{IT} \left[\left(\frac{-c^2 k_x k}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2 k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{x} + \left(\frac{c^2 k_y k}{\mu\epsilon\omega^2 - c^2 k^2} e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{y} + \left(e^{ik_x x + ik_y y} \right) \hat{z} \right] e^{ikz - i\omega t}, \quad (4.40)$$

Com a dispersão obtida, calculamos a frequência de corte ω_c que lê-se:

$$\omega_{mn}^{TE} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}}. \quad (4.41)$$

A velocidade de fase obtida possui a forma:

$$v_f^{TE} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 \right]}} > c. \quad (4.42)$$

O resultado usual é algo peculiar, pois mostra que ondas TE e TM se comportam como se fossem ondas refratadas da mesma forma dentro do guia, (onde $\theta = 0$), mas no *bulk* do material são permitidas apenas ondas TM, pois ondas TE não possuem dispersão com dependência espacial. As velocidades de fase se relacionam ao índice de refração n por $v_f = \frac{c}{n}$.

$$n_{TM}^{bulk} = \sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon} \right]} > n_{TE}^{guia} = n_{TM}^{guia} = \sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 \right]}. \quad (4.43)$$

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

A velocidade de grupo calculada é:

$$v_g^{TE} = \frac{c}{\mu\epsilon} \sqrt{1 - \frac{1}{\omega^2} \left[\left(\frac{m\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 \right]} < c. \quad (4.44)$$

Além destes resultados para cada modo no guia retangular, podemos calcular um efeito adicional vedando o guia de onda retangular de IT por duas paredes de metal perfeitamente condutoras em $z = 0$ e em $z = d$, assim teremos uma cavidade ressonante em forma de paralelepípedo. Nas paredes, perpendiculares ao eixo z , os campos obedecem condições de contorno triviais, ou seja, as correntes e densidades de carga induzidas são nulas. Desta forma teremos o número de onda $k = k_z$ dependente de um número inteiro s devido à condição de onda estacionária: $k_z = q\pi/d$. Teremos modos TE_{mns} e TM_{mns} em que os índices mns correspondem ao número de semiciclos nas três direções espaciais nesta situação. Assim como o guia retangular não permite que dois destes índices sejam nulos (pois anulariam os campos), nesta cavidade, dois índices tem de ser não nulos pelo mesmo argumento. As frequências de ressonância das ondas confinadas é obtida por meio da dispersão com correções para k_x e k_y que calculamos. O modo TE_{mns} não apresenta dependência em θ nas suas frequências e ressonância, porém o modo TM_{mns} por sua vez terá as frequências:

$$\omega_{mns} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}} = \frac{c}{\sqrt{\mu\epsilon}} \sqrt{\left(\frac{m\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 + \left(\frac{s\pi}{d} \right)^2 + \frac{\Lambda^2}{\mu\epsilon}}. \quad (4.45)$$

Que são da mesma ordem de grandeza das frequências de corte para o guia de onda retangular, ou seja, o menor valor é $\sim 10^{13} \text{ Hz}$.

4.3 Conclusões Preliminares e Perspectivas

No que se refere ao estudo dos modelos eletrodinâmicos, diferentemente do caso usual, as equações mostram termos extras e propriedades distintas das paredes metálicas com ordem de grandeza mensurável para um guia de onda feito de paredes de IT's. A

4. Guia de Onda Retangular e Descrição Efetiva da Atenuação no *Bulk* de Isolantes Topológicos

proposta traz novidades possibilitando uma análise e comparação que ainda não foi feita na literatura. O parâmetro θ aparece em cada equação diferencial de forma bastante distinta tanto na dependência direcional como nos produtos com os campos. Nos IT's aparecem correntes macroscopicamente mensuráveis e campos da superfície que modificam as propriedades das ondas na medida em que se propagam. Uma dificuldade adicional são as condições de contorno que são diferentes para cada campo, sendo bastante complicado garantir a consistência das equações e encontrar uma solução ou conjunto de soluções que seja geral com as amplitudes completamente determinadas, porém mostramos as correções que aparecem nas dispersões em um modo híbrido, e nos modos TM e TE, que respeitam os resultados conhecidos para $\theta = 0$ (no interior do guia de onda). O modo TE apresenta dispersão usual e é independente do parâmetro topológico, por esta razão ondas híbridas, TE e TM são refratadas de forma diferente para determinadas frequências maiores que o valor de corte obtido em cada caso. Os métodos que utilizamos para resolver o problema permitiram obter informações dos campos, potenciais, e correntes que estão em acordo com os modelos usuais e estão em acordo também com dados experimentais recentes [65]. Dentro do material as frequência possíveis foram obtidas via dispersão $\omega \sim 10^{13} Hz$ para $l \approx 1 nm$, valor que está em acordo com a perda da refletividade da parede do guia e o aumento da sua condutividade ótica. Dois artigos estão em preparação com base nestes resultados, um deles para o estudo do guia de onda retangular e outro em um guia de onda tipo *slab* [70, 71]. Um estudo mais aprofundado a respeito das propriedades óticas de um guia feito de outros materiais também é uma proposta interessante, uma vez que assumimos os valores apenas para o Bi_2Se_3 .

Como perspectivas para este trabalho, propomos como continuidade dos cálculos efetuados para outras geometrias, um estudo detalhado para uma cavidade ressonante com paredes de IT's, ou com paredes tanto de IT's combinadas com metais, ou até mesmo de metamateriais. Calculando a energia armazenada pelos campos que aparecem acoplados poderíamos obter uma expressão para o fator de qualidade da cavidade e comparar com os casos conhecidos.

Capítulo 5

Conclusões

Revisamos propriedades do modelo BHZ e propomos com base numa possível desigualdade entre parâmetros, $A^2 < 4MB$, segundo tendências nos dados experimentais da tabela 2.1, em que o poço quântico poderia ser mais largo $d \approx 950nm$ e apresentar soluções distintas daquelas da literatura [19]. Elaboramos uma proposta neste regime que é um mecanismo de filtro de *spin* conforme a Figura 2.6 para redirecionamento de férmions retroespalhados para canais da borda topologicamente protegidos. Tal proposta, permite acrescentar informações aos mecanismos de manipulação de *spin* em IT's da literatura [19, 45, 46]. Apresentamos de forma simples uma maneira de avaliar diferenças de corrente entre os canais usando uma barreira não magnética no *bulk* e ao mesmo tempo propor a que exista uma quebra da reversão temporal por efeito de interação entre a barreira e o acoplamento *spin*-órbita do material. Como consequência há correntes com *spin* invertido num IT 2D, o que tem sido obtido para semicondutores [44]. Verificamos que no *bulk*, um potencial fraco leva a resultados parecidos com os da mecânica quântica não-relativística, um potencial médio atenua todas as soluções para os espinores dentro da barreira e, como caso mais peculiar, um potencial forte habilita um tipo de paradoxo de Klein atenuado, dependente de parâmetros do modelo que figuram na transmitância. Também discutimos a possibilidade de acréscimo de uma barreira magnetostática sobreposta à eletrostática que poderia dificultar a criação dos pares partícula-buraco, aumentando o termo de massa que suprime o potencial forte. Um artigo em preparação com

5. Conclusões

estes resultados será submetido em breve [47].

Estudamos propriedades básicas de dois modelos: eletrodinâmica axiônica efetiva para descrição de IT's e eletrodinâmica CPT-par Lorentz-ímpar do Modelo Padrão Estendido. Diferentes maneiras de escrever os campos usando matrizes permitiram comparações, ainda que o primeiro não descreva um meio material, mas um vácuo anisotrópico. A descrição do momento do campo eletromagnético em IT's poderia ser verificada por meio dos índices de refração grandes [65]. Já o modelo Lorentz ímpar apresenta termos extras muito pequenos para correção do fluxo de densidade de momento vindo das componentes do tensor energia-momento. O modelo Lorentz-ímpar é uma das propostas de estudo de vínculos entre parâmetros cosmológicos para mostrar a variação da constante de estrutura fina α , enquanto o modelo axiônico é utilizado em FMC para calibração do valor desta constante. Apesar das propostas bastante distintas entre os modelos, mostramos que as comparações são relevantes.

No estudo da eletrodinâmica axiônica para a descrição de IT's em baixas energias, diferentemente do caso usual, as equações mostram termos extras de ordem de grandeza mensurável para um guia de onda feito de Bi_2Se_3 . O parâmetro θ aparece em cada equação diferencial de forma bastante distinta tanto na dependência direcional como nos produtos deste com os campos. As correntes macroscopicamente mensuráveis com base na distribuição que propomos modificam as propriedades das ondas na medida em que se propagam no IT. As relações de dispersão no modo híbrido, e nos modos TM e TE, respeitam os resultados conhecidos para $\theta = 0$. O modo TE apresenta dispersão usual e é independente do parâmetro topológico, por esta razão ondas híbridas, TE e TM são refratadas de forma diferente para determinadas frequências maiores que o valor de corte dentro da parede de IT. Os resultados estão em acordo com os modelos usuais e também com dados experimentais [69]. Dentro do material, as frequência de corte foram obtidas via dispersão tendo a ordem de grandeza, $\omega_c \sim 10^{13} \text{ Hz}$ nos modos híbrido e TM, valor que está em acordo com a perda da refletividade da parede do guia e principalmente pelo gigantesco aumento da sua condutividade ótica.

Apêndice A - Equação de Dirac e o Paradoxo de Klein

A Hamiltoniana e a Equação de Dirac

No início da teoria quântica, pensava-se que toda a informação sobre o elétron estava na equação de Schrödinger, uma equação diferencial de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo dada por:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi(\vec{r}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t), \quad (\text{A.1})$$

onde a solução $\psi(\vec{r}, t)$, a função de onda é uma função escalar que nos permite obter a maior parte das informações da estrutura eletrônica dos materiais em FMC. Com o avanço do conhecimento teórico e de experimentos cada vez mais precisos, as informações obtidas por meio dela mostraram-se incompletas, principalmente com relação à descrição relativística do elétron. Posteriormente, Pauli postulou uma equação, também não-relativística, mas que leva em consideração a interação do *spin* com o campo eletromagnético. A equação de Pauli lê-se:

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-e\vec{A}\right)\right]^2 + e\Phi\right\}\varphi = E\varphi, \quad (\text{A.2})$$

que incluía o *spin ad hoc*, por meio das matrizes $\vec{\sigma}$. Esta equação também pode ser comumente encontrada com um termo dependente do campo magnético \vec{B} . Isto pode ser feito usando a identidade de Pauli, $(\sigma\cdot\vec{a})(\sigma\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\sigma\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$, fazendo $\vec{a} = \vec{b} = \vec{\pi}$,

Apêndice A - Equação de Dirac e o Paradoxo de Klein

logo, $(\vec{\pi} \times \vec{\pi})^i \psi_1 = i \frac{e\hbar}{c} B^i \psi_1$, em que identificamos: $B^i = \epsilon^{ijk} \frac{\partial A^k}{\partial x^j}$, ou, $B^i = (\vec{\nabla} \times \vec{A})^i$. Após um trabalho algébrico reorganizando os termos, a equação de Pauli se torna:

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - e\frac{\vec{A}}{c} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\Phi \right] \varphi. \quad (\text{A.3})$$

As equações (A.1) e (A.2) são casos não-relativísticos da Equação de Dirac, onde as partículas em questão tem uma velocidade muito baixa para que os efeitos da relatividade sejam mais discrepantes. Klein e Gordon apresentaram uma proposta relativística para a descrição de partículas sem *spin*, por meio da equação:

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0. \quad (\text{A.4})$$

Porém, estudos posteriores desta equação, chamada de equação de Klein-Gordon, mostraram dificuldades no tratamento de uma corrente de probabilidade negativa e na inclusão dos efeitos devido ao *spin*. Em 1928, Dirac apresentou sua teoria originalmente propondo uma densidade hamiltoniana na seguinte forma matricial¹:

$$H_D \Psi = (c\hat{\alpha} \cdot \vec{p} + \hat{\beta}mc^2)\Psi = E\Psi. \quad (\text{A.5})$$

Uma representação mais comum das matrizes α e $\hat{\beta}$ são:

$$\hat{\alpha}^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{bmatrix}; \quad \hat{\beta} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

¹É importante que se faça a comparação da estrutura matricial desta equação com a densidade hamiltoniana do modelo BHZ. Os blocos diagonais do modelo BHZ são parecidos com a de Dirac e por esta razão alguns procedimentos para a obtenção de informações sobre *spin* e soluções de energia positiva e negativa também são parecidos. Convém observar que a forma dos espinores obtidos por meio desta equação se distingue principalmente devido às linhas nulas que são diferentes das soluções do modelo BHZ, o que pode ser verificado no paradoxo de Klein, discutido a seguir, onde as formas explícitas de Ψ são apresentadas para a equação de Dirac.

Apêndice A - Equação de Dirac e o Paradoxo de Klein

Onde σ^i são as matrizes de Pauli que se relacionam ao operador de *spin* por: $S^i = \frac{\hbar}{2}\sigma^i$ ².

$$\sigma^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Estas matrizes satisfazem as seguintes condições:

$$\hat{\alpha}^i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}^i = \begin{bmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{bmatrix} = 0. \quad (\text{A.8})$$

Existem as relações com às matrizes de Dirac na representação padrão dadas por: $\gamma^0 = \hat{\beta}$ e $\gamma^i = \hat{\beta}\hat{\alpha}^i$, que possibilitam obter a estrutura algébrica fundamental destas matrizes: $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}$. Neste formalismo covariante a equação de Dirac se torna:

$$\left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right) \Psi = 0. \quad (\text{A.9})$$

Esta equação descreve com sucesso partículas elementares de *spin*-1/2 como elétrons e neutrinos. Ao compararmos esta última com a equação de Klein-Gordon (A.4) vemos que essa não é uma equação de segunda ordem nas derivadas temporais e espaciais. A equação de Dirac não apresentou os problemas na definição de densidade de probabilidade e corrente por ser uma equação de primeira ordem. Além disso, a equação de Dirac introduziu teoricamente o conceito de antipartícula, confirmado experimentalmente pela descoberta em 1932 do pósitron, e mostrou que *spin* poderia ser obtido da equação de forma natural, diferente do que era feito na equação de Pauli. A solução Ψ é um espinor, um objeto com quatro componentes complexas que se transformam de forma específica sob Lorentz. É considerado uma representação $(1/2, 0) \oplus (0, 1/2)$ do grupo de Lorentz.

²Estas matrizes são uma representação do grupo especial unitário $SU(2)$ e possuem as propriedades: $(\sigma^i)^2 = \mathbf{1}$, $Tr[\sigma^i] = 0$, $Det[\sigma^i] = -1$. Além disto, obedecem as seguintes regras de comutação: $[\sigma^i, \sigma^j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma^k$. Onde ϵ^{ijk} é o tensor de Levi-Civita.

Apêndice A - Equação de Dirac e o Paradoxo de Klein

Em analogia à teoria não relativística, o momento canônico \vec{p} pode ser substituído pelo momento cinético $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ e podemos aumentar a energia de repouso somando um potencial escalar $e\Phi$. Com estas mudanças, a equação original de Dirac se torna:

$$\left\{ \left[\hat{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) \right] + \hat{\beta}mc^2 + e\Phi \right\} \Psi = E\Psi. \quad (\text{A.10})$$

No limite não-relativístico a energia de repouso mc^2 é a maior das energias envolvidas. Desta forma podemos escrever a solução na forma de um bi-espinor $\Psi = e^{-imc^2t/c} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, e a equação em termos das componentes pode ser escrita como as matrizes:

$$i\hbar \begin{bmatrix} \partial\psi_1 \\ \partial\psi_2 \end{bmatrix} = c \begin{bmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_2 \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\psi_1 \end{bmatrix} + e\Phi \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} - 2mc^2 \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Os termos $i\hbar\partial_t\psi_2$ e $e\Phi\psi_2$ podem ser desprezados se comparados a $2mc^2\psi_2$, implicando na relação: $\psi_2 = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc}\psi_1$. Com estes resultados podemos escrever uma equação para ψ_1 simplificada:

$$i\hbar\partial_t\psi_1 = \left(\frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) + e\Phi \right) \psi_1. \quad (\text{A.12})$$

Usando novamente a identidade de Pauli: $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$, após algumas manipulações algébricas obtém-se a equação de Dirac na forma abaixo:

$$i\hbar\partial_t\psi_1 = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - e\frac{\vec{A}}{c} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\Phi \right] \psi_1. \quad (\text{A.13})$$

Podemos observar que a equação (A.12) é a equação de Pauli para a mecânica quântica não-relativística (A.3) cuja solução é o espinor de duas componentes $\Psi_1 = \varphi$.

O Paradoxo de Klein para Partículas de Spin 1/2

Um dos problemas com solução exata mais comuns em mecânica quântica não-relativística é o tunelamento de partículas incidentes sobre um potencial energético tipo

Apêndice A - Equação de Dirac e o Paradoxo de Klein

degrau, ilustrado na figura 5.1. Por meio da Equação de Schrödinger, as soluções deste problema, mostram que se a energia da onda incidente (feixe de partículas-ondas) for menor que o valor de energia do degrau, ou seja, $E < V_0$, a onda é refletida e penetra na região classicamente proibida decaindo com $e^{-\kappa z}$, sendo $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. O caso relativístico deste problema envolve algumas soluções simples da equação de Dirac.

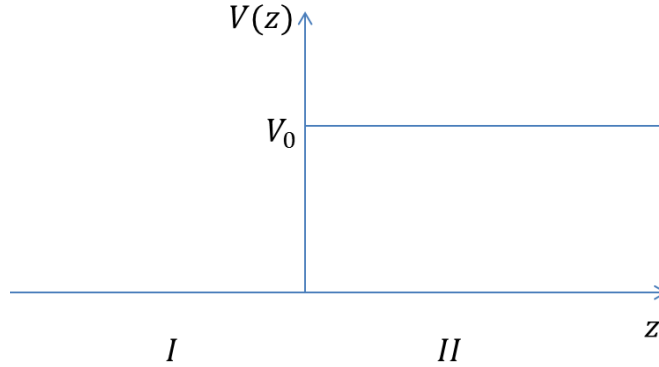


Figura 5.1: Na região I, temos o potencial nulo, onde encontram-se as solução de onda incidente e refletida. Na região II (classicamente proibida), temos as soluções transmitidas, onde o potencial é constante de valor V_0 . As partículas de spin 1/2 deste problema encontram-se em estado estacionário e a “altura” da barreira de potencial altera as possibilidades de tunelamento.

Assumindo que uma onda plana (ou um feixe de partículas) de momento $\vec{p} = p\hat{z} = \hbar k\hat{z}$, que carrega *spin* 1/2 viaja na direção z no sentido da esquerda para a direita em direção a uma barreira de potencial $V(z) = V_0\Theta(z)$, temos o espinor de Dirac que a representa:

$$\Psi_i = \mathcal{A}_i^\uparrow e^{ikz} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p}{E+mc^2} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

A onda refletida na região I é representada por:

$$\Psi_r = \mathcal{A}_r^\uparrow e^{-ikz} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-p}{E+mc^2} \\ 0 \end{bmatrix} + \mathcal{A}_r^\downarrow e^{-ikz} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-p}{E+mc^2} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

A transmitida, lê-se:

$$\Psi_t = \mathcal{A}_t^\uparrow e^{ik'z} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{p'}{E-V_0+mc^2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \mathcal{A}_t^\downarrow e^{ik'z} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{p'}{E-V_0+mc^2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Usando a representação padrão de Dirac das matrizes γ^μ citadas na seção acima, as correntes vetoriais incidente, refletida e transmitida são calculadas por $J^i = \bar{\Psi}\gamma^i\Psi$, sendo $\bar{\Psi}$ o conjugado de Dirac $\bar{\Psi} = \gamma^0\Psi^\dagger$. As correntes são:

$$J_{inc} = \frac{2|\mathcal{A}_i^\uparrow|^2 ck\hbar}{E + mc^2}, \quad (\text{A.17})$$

$$J_{ref} = \frac{2|\mathcal{A}_r^\uparrow|^2 ck\hbar}{E + mc^2}, \quad (\text{A.18})$$

$$J_{trans} = \frac{2|\mathcal{A}_t^\uparrow|^2 ck\hbar}{E - V_0 + mc^2}. \quad (\text{A.19})$$

Que obedecem $J_{inc} = J_{ref} + J_{trans}$. Desta forma podemos calcular a transmitância e a reflectância, respectivamente: $T = \frac{J_{trans}}{J_{inc}}$, $R = \frac{J_{ref}}{J_{inc}}$.

Impondo as condições de fronteira $\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0)$ e considerando que o *spin* não é revertido pela barreira, obtemos relações entre as amplitudes que nos permite eliminá-las na expressões de T e R: $\mathcal{A}_i^\uparrow + \mathcal{A}_r^\uparrow = \mathcal{A}_t^\uparrow$, $\mathcal{A}_i^\uparrow - \mathcal{A}_r^\uparrow = \Omega\mathcal{A}_t^\uparrow$ onde $\Omega = \frac{k'}{k} \frac{E+mc^2}{E-V_0+mc^2}$. Com estas informações, temos:

$$T = \frac{4\Omega}{|1 + \Omega|^2} \quad (\text{A.20})$$

$$R = \frac{1 - \Omega}{1 + \Omega} \quad (\text{A.21})$$

Verifica-se que se o potencial é forte, ou seja, $V_0 > E + mc^2$, a razão Ω se torna negativa, levando a uma transmitância T negativa, o que chamamos de paradoxo de Klein, pois implicaria em uma quantidade de partículas espalhadas que violaria a conservação da probabilidade. O fato é que a probabilidade permanece conservada se considerarmos as soluções de energia negativa das equação e Dirac, que não só descreve o elétron com momento p e energia positiva, mas partículas idênticas a elétrons, porém com carga positiva e energia negativa. Esta solução de energia negativa também existe para partículas livres e Dirac as chamou de “buracos” que ocupavam todos os estados de energia negativa, o famoso “mar de Dirac”. O pósitron previsto na equação foi considerado um buraco no mar de Dirac, antes de sua descoberta em 1932.

Apêndice B - Guia de Onda Retangular de Paredes Perfeitamente Condutoras na Eletrodinâmica de Maxwell

Apresentamos aqui alguns resultados da eletrodinâmica usual no guia de onda retangular como o da figura 4.3, porém com paredes metálicas perfeitamente condutoras. Tais resultados podem ser facilmente encontrados na literatura, como em [29–31].

Guia de Onda Retangular

Se tivermos ondas monocromáticas que se propagam na direção z que escolhemos como sendo o eixo do guia no interior do guia onde há vácuo ($\mu = \epsilon = 1$). Temos campos com a forma:

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}(x, y, z, t) &= \vec{E}_o(x, y) e^{i(kz - \omega t)} \\ \vec{B}(x, y, z, t) &= \vec{B}_o(x, y) e^{i(kz - \omega t)} \end{aligned} \right\}. \quad (\text{B.1})$$

Sendo $\vec{E}_o(x, y)$ e $\vec{B}_o(x, y)$ as amplitudes dos campos, que só dependem de x e y . Podemos reescrevê-las da seguinte forma:

$$\vec{E}_o = E_x \hat{x} + E_y \hat{y} + E_z \hat{z}, \quad \vec{B}_o = B_x \hat{x} + B_y \hat{y} + B_z \hat{z}. \quad (\text{B.2})$$

Considerando a forma geral para ondas planas, equações (B.1), como soluções das

Apêndice B - Guia de Onda Retangular de Paredes Perfeitamente Condutoras na Eletrodinâmica de Maxwell

equações de Maxwell na ausência de fontes, podemos então determinar as amplitudes dos campos, eqs. (B.2), para essas equações e desta maneira determinaremos os campo elétrico e magnético, dados pelas eqs. (B.1). Uma maneira de fazer isso é utilizar (B.1) nas equações para as componentes x e y para o rotacional de $\vec{E}(x, y, z, t)$ e $\vec{B}(x, y, z, t)$, e por conseguinte, escrever as componentes x e y das amplitudes dos campos (B.2), em função da componentes na direção z e suas derivadas:

$$\left. \begin{aligned} E_x &= \frac{i}{\omega^2 - k^2} (k \partial_x E_z + c \omega \partial_y B_z) \\ E_y &= \frac{i}{\omega^2 - k^2} (k \partial_y E_z - c \omega \partial_x B_z) \\ B_x &= \frac{i}{\omega^2 - k^2} (k \partial_x E_z - c \omega \partial_y B_z) \\ B_y &= \frac{i}{\omega^2 - k^2} (k \partial_y E_z + c \omega \partial_x B_z) \end{aligned} \right\}. \quad (\text{B.3})$$

Substituindo novamente nas equações de Maxwell restantes se obtêm as equações diferenciais lineares e desacopladas para os campos axiais:

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \omega^2/c^2 - k^2) E_z = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \omega^2/c^2 - k^2) B_z = 0. \quad (\text{B.5})$$

Modo Transverso Magnético (TM)

A equação que determina a forma dos campos axiais neste caso é (B.4). As soluções $E_z(x, y)$ para esta equação são bem conhecidas [29–31]. Aplicando as condições de contorno $B^\perp = 0$, obtemos:

$$E_z = E_0 \text{sen}(m\pi x/a) \text{sen}(n\pi y/b), \quad (\text{B.6})$$

em que m e n são números inteiros e E_0 é uma constante com dimensão do campo elétrico.

A relação de dispersão é

$$\omega^2/c^2 = k^2 + (m\pi/a)^2 + (n\pi/b)^2, \quad (\text{B.7})$$

Apêndice B - Guia de Onda Retangular de Paredes Perfeitamente Condutoras na Eletrodinâmica de Maxwell

A frequência de corte ω_{mn} , que limita inferiormente os valores possíveis de frequência para as ondas do guia é:

$$\omega_{mn} = c\pi\sqrt{\left(\frac{m}{a}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^2}. \quad (\text{B.8})$$

O modo de menor frequência é $\omega_{10} = \pi/a$. Para frequências abaixo deste valor as ondas não se propagam no guia de onda em questão, pois isto leva um vetor de onda imaginário, o que significa uma atenuação.

A velocidade de fase e de grupo em unidades SI são:

$$v_{fase} = \frac{\omega}{k} = c\frac{1}{\sqrt{1 - (\omega_{mn}/\omega)^2}} > c, \quad (\text{B.9})$$

$$v_g = \frac{1}{dk/d\omega} = c\sqrt{1 - (\omega_{mn}/\omega)^2} < c. \quad (\text{B.10})$$

Aqui vemos que a velocidade de fase é superior à velocidade da luz no vácuo. A velocidade de grupo é mesma velocidade de transporte de energia e é inferior à c .

Modo Transverso Elétrico (TE)

No modo chamado TE em que a componente E_z do campo elétrico se anula. Temos a seguinte solução para (B.4) dadas as condições de contorno $\vec{E}^{\parallel} = \vec{0}$.

$$B_z = B_0 \cos(m\pi x/a) \cos(n\pi y/b), \quad (\text{B.11})$$

em que m e n são números inteiros e B_0 é constante com dimensão de campo magnético.

A relação de dispersão, a frequência de corte, a velocidade de fase e de grupo têm formas análogas às da seção anterior e podem ser encontradas também em [29–31].

Sobre as Soluções da Eletrodinâmica Usual

As soluções destas equações diferenciais são bem conhecidas na literatura, tanto para o caso geral quanto para os modos TE e TM que são mais simples, usando as

Apêndice B - Guia de Onda Retangular de Paredes Perfeitamente Condutoras na Eletrodinâmica de Maxwell

condições de contorno usuais, que impõem que o campo elétrico paralelo às paredes seja nulo e o campo magnético perpendicular às paredes seja nulo [29–31].

Uma interpretação alternativa vinda de um tratamento de mecânica quântica relativística, permite escrever as equações de Maxwell na forma espinorial, uma equação tipo-Dirac, cujas soluções possíveis são bi-espinores que carregam os campos \vec{E} e \vec{B} . Este tipo de análise permite interpretar fisicamente que o comportamento das ondas dentro de um guia de onda é similar à ondas de matéria de de Broglie e os fótons guiados podem ser tratados como partículas massivas livres. Detalhes podem ser vistos na referência [72].

Referências Bibliográficas

- [1] Rundog Li, “*Exotic Particles in Topological Insulators*”, PhD Thesis, Department of Physics of Stanford University, Julho (2010).
- [2] E. Castellani, “*Effective Field Theories, Reductionism and Scientific Explanation*”, *Studies in History and Philosophy of Science* **32**, Issue 2, Junho (2001), p. 267-304. Veja também: arXiv:physics/0101039v1 [physics.hist-ph].
- [3] S. Hartmann, “*Reductionism, emergence, and effective field theories*”, *Studies in History and Philosophy of Science* **33**, Issue 2, Junho (2002), p. 251-267.
- [4] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. “*The rise of graphene*”, *Reviews of Modern Physics* **81**, 109162 (2009).
- [5] D. J. Kim, J. Xia e Z. Fisk , “*Topological surface state in the Kondo insulator samarium hexaboride*”, *Nature Materials* **13**, 466470 (2014).
- [6] Motohiko Ezawa , “*From Graphene to Silicene, Germanene and Stanene: Topology and Interaction Effects*”, *Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013)*. *JPS Conference Proceedings* , 012001 (2014).
- [7] H. Cao, J. Tian, I. Miotkowski, T. Shen, J. Hu, S. Qiao, and Y. P. Chen, “*Quantized Hall Effect and Shubnikov de Haas Oscillations in Highly Doped Bi₂Se₃: Evidence for Layered Transport of Bulk Carriers*”, *Physical Review* **D 108**, 216803. 23 de Maio (2012).

Referências Bibliográficas

- [8] J. C. Maxwell, “*A Treatise on Electricity and Magnetism*”, Vol. 1, Clarendon Press, (1873).
- [9] T. Ando, Y. Matsumoto, and Y. Uemura. “*Theory of Hall Effect in a Two-Dimensional Electron System*”, Journal of the Physical Society of Japan **39**, p. 279-288 (1975).
- [10] “*The Nobel Prize in Physics in 1998*”. [http : //www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1998/press.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1998/press.html)
- [11] Nobel Prize <http://nobelprize.org/nobel-prizes/physics/laureates/>.
- [12] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs “*Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*”, Physical Review Letters **49**, 405, 9 de Agosto (1982).
- [13] M. Z. Hasan “*Colloquium: Topological insulators*”, Reviews of Modern Physics **82**, 30458, Novembro (2010).
- [14] M. I. Dyakonov, V. I. Perel, “*Possibility of Orienting Electron Spins with Current*”, Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters **13**, p. 467 (1971).
- [15] M. I. Dyakonov, V. I. Perel, “*Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors*”, Physics Letters A **35**, Issue 6, p. 459460, 12 de Julho (1971),
- [16] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, D. D. Awschalom, “*Observation of the spin Hall effect in semiconductors*”, Science 306 (5703), 1910-1913 (2004).
- [17] C.L Kane and E. J. Mele, “*Quantum Spin Hall Effect in Graphene*”, Physical Review Letters **95**, 226801 (2005).
- [18] M. Konig, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C-X Liu, X-L Qi e S-C Zhang, “*The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment*”, Journal of the Physical Society of Japan **77**, N^o. 3, 031007 Março (2008).

Referências Bibliográficas

- [19] X.-L. Qi and S.-C Zhang, “*Topological Insulators and Superconductors*”, Review of Modern Physics **83**, 1057 (2011); veja também: arXiv:1008.2026 [cond-mat.mes-hall].
- [20] Pascal Gehring, H. M. Benia, Y. Weng, R. Dinnebier, C. R. Ast, M. Burghard, K. Kern “*A Natural Topological Insulator*”, Nano Letters, Article ASAP DOI: 10.1021/nl304583m.
- [21] J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, “*Geometrically induced electric polarization in conical topological insulators*”, Journal of Applied Physics, **111**, Issue 6, p. 064913-064913-4 (2012).
- [22] J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira , “*Scattering of charge carriers in graphene induced by topological defects*”, Physics Letters A (Print), v. 374, p. 4359-4363, (2010).
- [23] Chen Si, Junwei Liu, Yong Xu, Jian Wu, Bing-Lin Gu, and Wenhui Duan, “*Functionalized germanene as a prototype of large-gap two-dimensional topological insulators*”, Physical Review **B 89**, 115429. 24 de Março (2014).
- [24] Boubekour Lalmi, Hamid Oughaddou, Hanna Enriquez, Abdelkader Kara, Sébastien Vizzini, Bénédicte Ealet and Bernard Aufray, “*Epitaxial growth of a silicene sheet*”, Applied Physics Letters. 97, 223109 (2010).
- [25] T. M. Schmidt, R. H. Miwa, and A. Fazzio. “*Spin texture and magnetic anisotropy of Co impurities in Bi₂Se₃ topological insulators*”, Physical Review **B 84**, 245418. 13 de Dezembro (2011).
- [26] C. M. C. de Castilho, V. B. Nascimento, E. A. Soares, A. S. C. Esperidião, F. B. Mota, V. E. de Carvalho. “*Difração de elétrons de baixa energia (LEED) e a determinação da estrutura atômica de superfícies ordenadas*”, Revista Brasileira de Ensino de Física, **27**, N^o. 4 São Paulo. Outubro/Dezembro (2005).

Referências Bibliográficas

- [27] Z. Alpichshev, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, Y. L. Chen, Z. X. Shen, A. Fang, and A. Kapitulnik, “*STM Imaging of Electronic Waves on the Surface of Bi₂Te₃: Topologically Protected Surface States and Hexagonal Warping Effects*”, Physical Review Letters **104**, 016401. 4 de Janeiro (2010).
- [28] Dimitrios Koumoulis, *et al* “*NMR Probe of Metallic States in Nanoscale Topological Insulators*”, Physical Review Letters, **110**, 026602. 9 de Janeiro (2013).
- [29] J. D. Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, Wiley, New York, Third Edition (1999).
- [30] D. J. Griffiths, “*Introduction to Electrodynamics*”, Prentice Hall, Third Edition, (1999).
- [31] H. J. W. Müller-Kirsten, “*Electrodynamics: An Introduction Including Quantum Effects*”, World Scientific Publishing, (2004).
- [32] A. G. Nikitin and O. Kuriksha, “*Symmetries of field equations of axion electrodynamics*”, Physical Review **D 86**, 025010 (2012).
- [33] J. Maciejko, X. Qi, H. D. Drew, S. Zhang, “*Topological Quantization in Units of the Fine Structure Constant*”, Physical Review Letters **105**, 166803 (2010)
- [34] X. Qi, R. Li, J. Zang, S. Zhang, “*Inducing a Magnetic Monopole with Topological Surface States*, Science **323**, 27 de Fevereiro (2009).
- [35] Quansheng Wu and Vincent E. Sacksteder, IV, “*Bulk effects on topological conduction in three-dimensional topological insulators*”, Physical Review **B**, **90**, 045408. 14 de Julho (2014).
- [36] M-C. Chang M-F. Yang. “*Optical signature of topological insulators*”, Physical Review **B 80**, 113304 (2009).
- [37] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, “*Física do Estado Sólido*”, São Paulo: Cengage, (2011).

Referências Bibliográficas

- [38] S-Q. Shen, W-Y Shan, H-Z Lu, “*Topological insulator and the Dirac equation*”, <http://arxiv.org/abs/1009.5502v3> [cond-mat.mes-hall], 19 de Junho (2012).
- [39] J. Moore, “*The Birth of Topological Insulators*”, *Nature Physics* **5**, 378 - 380 (2009).
- [40] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp and X. Qi, S.-C Zhang, “*Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*”, *Science* **318**, 5851, p. 766-770 (2007).
- [41] J.-H. Gao, J. Yuan, W.-Q. Chen, Y. Zhou, and F.-C. Zhang, “*Giant mesoscopic spin Hall effect on surface of topological insulator*”, *Physical Review Letters* **106**, 057205 (2011).
- [42] J. Luo and A. Zunger, “*Design Principles and Coupling Mechanisms in the 2D Quantum Well Topological Insulator HgTe/CdTe*”, *Physical Review Letters* **105**, 17685 22 (2010).
- [43] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “*The quantum spin Hall effect and topological insulators*”, *Physics Today* **63**, (2010).
- [44] P. Di Pietro *et al*, “*Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier*”, *Physical Review* **B 67**, 201304R (2003)
- [45] Y. Zhou, and F.-C. Zhang, “*Left Right Up Down*”, *Nature Physics*, (2012).
- [46] C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X-L Qi and S-C Zhang, “*Spin polarization of the quantum spin Hall edge states*”, *Nature Physics* **8**, (2012).
- [47] D. R. Viana, T. M. Melo, J. M. Fonseca, D. S. Souza, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, “*Switching channels of spin polarized currents in two-dimensional topological insulator*”, trabalho em preparação.
- [48] C. Liu, T. L. Hughes, X. Qi, K. Wang and S. Zhang, “*Quantum Spin Hall in Inverted Type II Semiconductors*”, *Physical Review Letters* **100**, 236601 (2008).

Referências Bibliográficas

- [49] L. H. Ryder, “*Quantum Field Theory*”, Cambridge Univ. Press, New York, Second Edition, (1996).
- [50] D. R. Viana, “*Algumas Contribuições ao Estudo do Modelo Padrão Estendido: Radiação CPT-par Confinada a Guias de Ondas*”, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, (2010).
- [51] A. H. Gomes, J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, “*Testing CPT- and Lorentz-odd electrodynamics with waveguides*”, Journal of High Energy Physics **104** (2010).
- [52] Massimo Testa, “*The momentum of an electromagnetic wave inside a dielectric*”, Annals of Physics, **1** , 336 (2013)
- [53] Robert N. C. Pfeifer, *et al.* “*Momentum of an electromagnetic wave in dielectric media*”, Review of Modern Physics **79**, 1197 (2009)
- [54] V. A. Kosteleký and R. Lehnert, “*Stability, Causality and Lorentz and CPT Violation*”, Physical Review **D 63**, 065008 (2001).
- [55] D. Colladay, V. A. Kostelecký, “*CPT Violation and the Standard Model*”, Physical Review **D 55** 6760 (1997).
- [56] V. A. Kosteleký, S. Samuel, “*Spontaneous breaking of Lorentz symmetry in string theory*”, Physical Review **D, 39**, 683 (1989).
- [57] V. A. Kosteleký and S. Samuel, “*Spontaneous breaking of Lorentz symmetry in string theory*”, Physical Review **D 39**, 683 (1989).
- [58] M. Mewes, A. Petrof, “*Cavity Tests of Parity-Odd Lorentz Violations in Electrodynamics*”, Physical Review. **D 75**, 056002 (2007).
- [59] R. Casana, M. M. Ferreira Jr, and C. E. H. Santos, “*Classical solutions for the Lorentz-violating and CPT-even term of the standard model extension*”, Physical Review **D 78**, 105014 (2008).

Referências Bibliográficas

- [60] F. R. Klinkhammer “*New Indirect Bounds on Lorentz Violation in the Photon Sector*”, arXiv:0810.1446v3 [hep-ph] 27 de Outubro (2008).
- [61] D. Colladay and V. A. Kostelecký, “*Lorentz-Violating Extension of the Standard Model*”, arXiv:hep-ph/9809521v1. 24 de Setembro (1998).
- [62] V. A. Kostelecký and M. Mewes “*Signals for Lorentz Violation in Electrodynamics*”, Physical Review **D 66**, 056005 (2002).
- [63] D. R. Viana, A.H. Gomes, J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo, “*Studying Lorentz-odd CPT-even with waveguides*”, Proceedings of Science, PoS ICFI2010, **012**, Agosto (2010).
- [64] V. A. Kostelecký, R. Lehnert, and M. J. Perry “*Spacetime-varying couplings and Lorentz violation*”, arXiv:astro-ph/0212003v1. 30 de Novembro (2002).
- [65] Jacob Linder, Takehito Yokoyama, e Asle Sudbo, “*Anomalous Finite Size Effects on Surface States in the Topological Insulator Bi_2Se_3* ”, New Journal of Physics. **12** 065013 (2010).
- [66] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “*Electrodynamics of Continuous Media*”, Pergamos Press, New York, 337 (1975).
- [67] Quang A Dang , Matthias Ehrhardt, “*On Dirac delta sequences and their generating functions*”, Applied Mathematics Letters, **25** (12), 2385 (2012).
- [68] Wei Zhang, Rui Yu, Hai-Jun Zhang, Xi Dai e Zhong Fang “*First-principles studies of the three-dimensional strong topological insulators Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 and Sb_2Te_3* ”, Physical Review **B 80**, 205401 (2009).
- [69] P. Di Pietro *et al*, “*Optical conductivity of bismuth-based topological insulators*”, Physical Review B **86**, 045439 (2012).
- [70] D. R. Viana, T. M. Melo, J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo “*Attenuated solutions in a waveguide with topological insulator walls*”, trabalho em preparação.

Referências Bibliográficas

- [71] T. M. Melo, D. R. Viana, J. M. Fonseca, W. A. Moura-Melo “*Radiation inside a slab waveguide with topological insulator walls*”, trabalho em preparação.
- [72] Zhi-Yong Wang, Cai-Dong Xiong, “*Photons inside a waveguide as massive particles*”, arXiv:0708.3519v4[quant-ph]. 19 de Agosto (2008).