

UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

Efeitos de curvatura em nanopartículas de isolantes topológicos

Leonardo Gomides Veiga
Doctor Scientiae

VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025

LEONARDO GOMIDES VEIGA

Efeitos de curvatura em nanopartículas de 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*.

Orientador: Winder A. de Moura Melo

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

V426e
2025 Veiga, Leonardo Gomides, 1995-
Efeitos de curvatura em nanopartículas de isolantes
topológicos / Leonardo Gomides Veiga. – Viçosa, MG, 2025.
1 tese eletrônica (58 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Winder Alexander de Moura Melo.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2025.

Referências bibliográficas: f. 49-52.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.597>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Partículas (Física nuclear). 2. Sólidos quânticos. I.
Melo, Winder Alexander de Moura, 1973-. II. Universidade
Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de
Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 539.725

LEONARDO GOMIDES VEIGA

Efeitos de curvatura em nanopartículas de 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: 23 de julho de 2025.

Assentimento:

Leonardo Gomides Veiga
Autor

Winder Alexander de Moura Melo
Orientador

Essa tese foi assinada digitalmente pelo autor em 17/09/2025 às 19:37:09 e pelo orientador em 18/09/2025 às 00:41:59. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **3LK3.RB2C.OG52** e clique no botão 'Validar documento'.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que colaboraram, direta ou indiretamente, para a realização deste trabalho. Em especial, ao meu orientador Winder A. Moura-Melo pela oportunidade, aos meus amigos e à minha família. Este trabalho foi realizado com o apoio das seguintes agências de pesquisa brasileiras: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

RESUMO

VEIGA, Leonardo Gomides, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, julho de 2025. **Efeitos de curvatura em nanopartículas de isolantes topológicos**. Orientador: Winder Alexander de Moura Melo.

Neste trabalho, investigamos a dinâmica dos estados de borda em isolantes topológicos com geometrias não triviais, especificamente a geometria cônica e toroidal. Para o isolante topológico cônico, encontramos o operador de Dirac efetivo que descreve os férmions de massa nula na superfície, incluindo termos de conexão de spin e correções de velocidade dependentes do ângulo de abertura. Resolvemos as equações e caracterizamos completamente os estados. Os estados de baixa energia se localizam na ponta do cone e a curvatura singular quebra o `\textit{spin-to-surface locking}`, induzindo componentes de spin fora do plano. No caso toroidal, resolvemos numericamente as equações tipo-Dirac e caracterizamos completamente os estados de superfície. Também estudamos sua resposta óptica, encontrando uma resposta plasmônica topológica nova que amplifica a absorção de luz por uma ordem de grandeza.

Palavras-chave: pontos quânticos; confinamento quântico; isolantes topológicos; espaços curvos

ABSTRACT

VEIGA, Leonardo Gomides, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2025. **Curvature effects in topological insulator nanoparticles.** Adviser: Winder Alexander de Moura Melo.

In this work, we investigate the dynamics of edge states in topological insulators with nontrivial geometries, specifically the conical and toroidal geometry. For the conical topological insulator, we find the effective Dirac operator that describes the massless fermions at the surface, including spin-connection terms and velocity corrections dependent on the opening angle. We solve the equations and fully characterize the states. The low-energy states are located at the tip of the cone and the singular curvature breaks the `\textit{spin-to-surface locking}`, inducing out-of-plane spin components. In the toroidal case, we solve numerically the Dirac-type equations and fully characterize the surface states. We also study its optical response, finding a novel topological plasmonic response that amplifies the light absorption by an order of magnitude.

Keywords: quantum dots; quantum confinement; topological insulator; curved spaces

Sumário

1	Introdução	7
1.1	Invariantes topológicos	7
1.2	O Efeito Hall quântico, estrutura de bandas topológicas e estados de superfície .	10
1.3	Isolantes topológicos e o modelo BHZ	12
1.4	Nanopartículas de Isolantes Topológicos	15
1.5	Motivações para os trabalhos	17
2	Nanopartícula cônica de isolante topológico	18
2.1	A geometria do cone	18
2.2	Os estados de superfície e suas energias	19
3	O isolante topológico toroidal	28
3.1	Aspectos básicos da geometria toroidal	28
3.2	Sobre a dinâmica na superfície do toro	29
3.2.1	Estados de superfície e espectro para o caso geral	34
3.3	Sobre a interação de nanopartículas de isolante topológico toroidal com a luz .	39
4	Conclusões e perspectivas	47
	Appendices	53
A	Operador de Dirac para estados de borda no isolante topológico cônico	53
B	Potencial elétrico do isolante topológico toroidal sob a influência de uma onda eletromagnética	57

Capítulo 1

Introdução

Durante boa parte do século XX, os estados da matéria em geral eram descritos de acordo com suas fases ordenadas, dentro do contexto da teoria de Ginzburg e Landau [1]. Esta teoria estabelece que cada fase tem um parâmetro de ordem local, que é não-nulo na fase ordenada e zero na fase desordenada, e que as transições de fase ocorrem quando há quebra de simetria. Por exemplo, o congelamento da água quebra a simetria translacional, a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética à temperatura de Curie corresponde à quebra de uma simetria rotacional de spins, enquanto a transição supercondutora está associada à quebra da simetria de calibre. No entanto, esta descrição dos materiais baseada nas quebras espontâneas de simetrias teve que ser reavaliada após a descoberta do efeito Hall quântico (EHQ), em sua versão EHQ inteiro (trabalho de von Klitzing et al. de 1980 [2]). A partir daí, havia um novo estado da matéria que não estava dentro da teoria de Landau-Ginzburg. Esse estado não depende de quebras espontâneas de simetria e a transição de fase que aí ocorre é de natureza topológica. Este trabalho representa o início de outro ramo da física chamado de **Estados Topológicos da Matéria**, que são caracterizados por certas quantidades chamadas de **invariantes topológicos**. Abaixo, apresentaremos brevemente o conceito de invariantes topológicos e como isso é estendido para o contexto da física.

1.1 Invariantes topológicos

Em geral, invariantes topológicos são construídos como integrais de uma propriedade local sobre uma variedade de parâmetros fechada. Do ponto de vista da topologia como uma área da Matemática, podemos discutir sobre a relação entre propriedades globais e locais aplicando o teorema de Gauss-Bonnet para a esfera e para o toro, por exemplo. A curvatura local de uma superfície pode ser medida via

$$K = \frac{\langle (\nabla_2 \nabla_1 - \nabla_1 \nabla_2) \mathbf{e}_1 \mid \mathbf{e}_2 \rangle}{\det g}, \quad (1.1)$$

onde \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 são vetores unitários na superfície e g é a métrica. Para a esfera, temos $K_{\text{esfera}} = \frac{1}{R^2}$ (com R sendo o raio da esfera), enquanto que, para o toro temos $K_{\text{toro}} = \frac{\sin\theta}{r(R+r\sin\theta)}$ (com r sendo o raio menor, R o raio maior do toro e θ é o ângulo poloidal). A curvatura é positiva ou negativa dependendo se ela é convexa ou côncava em relação a um ponto fixo. Para a esfera a curvatura é sempre positiva, enquanto para um toro a curvatura é positiva, zero ou negativa em diferentes pontos da superfície.

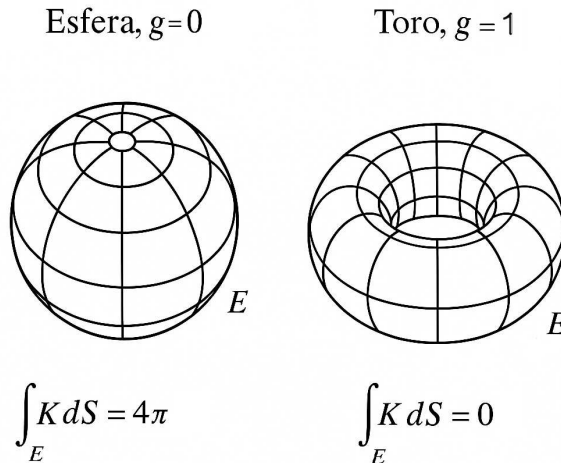


Figura 1.1: Ilustração da aplicação do teorema de Gauss-Bonnet para a esfera e para o toro.

Podemos mudar a curvatura em um ponto sob deformação contínua, mas, se a integramos sobre toda a superfície fechada sempre temos o mesmo valor, de acordo com o teorema de Gauss-Bonnet [3]:

$$\int_E K dS = 4\pi(1 - g), \tag{1.2}$$

onde g representa um número inteiro não-negativo e é chamado de **genus**. Para a esfera, a integral vale 4π , enquanto para o toro obtemos 0. O genus é associado com a quantidade de “buracos” presentes na superfície, de modo que $g = 0$ para a esfera e $g = 1$ para o toro. Essa quantidade é um invariante topológico da superfície e não pode ser determinado estudando apenas as propriedades locais; seu cálculo só pode ser realizado através da integração sobre toda a superfície. Superfícies que possuem o mesmo valor de genus são topologicamente equivalentes e podem ser continuamente deformadas uma na outra. Do mesmo modo, nenhuma transformação suave conseguirá conectar superfícies com valores distintos de genus, como no caso da esfera e do toro. A única maneira de transformarmos uma esfera num toro é fazendo uma transformação abrupta (um furo ou um “rasgo” na esfera).

A possibilidade ou não de deformar continuamente objetos uns nos outros, e o fato dos sistemas serem classificados por parâmetros que necessitam de uma medição global ao invés de uma avaliação local são o cerne da Topologia. Trazendo essas ideias para a física, podemos pensar, por exemplo em Hamiltonianos descrevendo sistemas de muitas partículas com um *gap*

de energia entre os estados fundamental e excitado. Aqui, o conceito de deformação suave é definido como uma mudança adiabática (por operações denominadas difeomorfismos) de algum parâmetro (ou do próprio Hamiltoniano) que não fecha esse *gap* de energia. Portanto, se pudermos conectar dois Hamiltonianos por uma transformação adiabática, eles são topologicamente equivalentes. Por outro lado, se temos dois Hamiltonianos que são topologicamente distintos, não conseguimos conectá-los via uma transformação suave e a coexistência entre eles leva ao fechamento do *gap* [4]. Para entender essa afirmação, consideremos um sistema isolante descrito pelo Hamiltoniano H . Podemos suavemente deformá-lo num novo Hamiltoniano H' variando lentamente os parâmetros sistema. Se o *gap* permanece aberto durante a transformação, o número de estados na banda de valência é necessariamente conservado, pois embora estes estados possam se misturar durante a transformação, a única maneira do número total mudar é fechando o *gap* e permitindo que estados entrem ou saiam para a banda de condução. Nesse contexto, invariantes topológicos do Hamiltoniano geralmente são calculados integrando a curvatura ou uma propriedade análoga sobre as bandas ocupadas do material (ou seja, estão relacionadas com o número de estados na banda de valência) e, portanto, só mudarão de valor se o *gap* se fechar durante uma transformação.

De forma análoga à curvatura Gaussiana descrita anteriormente, podemos definir a chamada curvatura de Berry do espaço dos autoestados. Em uma estrutura cristalina, podemos explorar a natureza periódica do potencial e escrever as funções de onda como estados de Bloch [5], levando à formação de bandas de energia associadas aos autoestados do sistema:

$$\Psi_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

onde v é um índice de banda, \mathbf{k} é um vetor de onda no espaço recíproco (convencionalmente escolhido para estar na zona de Brillouin) e $u_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é uma função periódica. Podemos então calcular a curvatura de Berry no espaço recíproco. O teorema de Bloch também implica que a própria zona de Brillouin é fechada, e assim podemos integrar a curvatura e outras quantidades sobre uma superfície fechada, como fizemos com a curvatura Gaussiana.

Nesse sentido, vamos considerar um Hamiltoniano de Bloch e definir um invariante topológico \mathcal{C} , chamada número de Chern [6]:

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{S}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} \quad (1.3)$$

onde a superfície \mathcal{S} é um espaço 2D fechado (como a zona de Brillouin bidimensional) e \mathbf{F} é a curvatura de Berry. Note a semelhança desse integral com a equação 1.2. De fato, o número de Chern é um inteiro quantizado (assim como o genus), e permanece invariante sob transformações contínuas, podendo ser usado para identificar diferentes fases topológicas: dizemos que um sistema com número de Chern $\mathcal{C} = 0$ está numa fase trivial, e que um sistema com $\mathcal{C} \neq 0$ está numa fase topológica. Bandas com $\mathcal{C} \neq 0$ são chamadas **bandas de Chern**. Só é possível obter

um número de Chern não-nulo se a simetria de reversão temporal (simetria \mathcal{T}) for quebrada [6].

1.2 O Efeito Hall quântico, estrutura de bandas topológicas e estados de superfície

O efeito Hall quântico inteiro, descoberto em 1980 por von Klitzing et al., foi o primeiro estado da matéria a apresentar um *gap* de energia (como um isolante) e não ser topologicamente equivalente ao vácuo, exibindo propriedades de transporte não triviais. Um sistema Hall quântico é criado aplicando-se um campo magnético intenso num gás de elétrons confinados à 2D (2DEG) a baixíssimas temperaturas. Imersos no campo magnético, os elétrons formam níveis de Landau quantizados com dispersão plana (ou seja, a energia de cada nível de Landau é praticamente independente do momento). Na borda, a presença da fronteira empurra os níveis de Landau através da energia de Fermi. Para N níveis de Landau preenchidos, obtém-se uma condutância de Hall de

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.4)$$

Os níveis de Landau podem ser vistos como bandas de energia para os elétrons, e, se N níveis de Landau estiverem preenchidos, um *gap* de energia separa os estados ocupados dos não ocupados — como ocorre em um isolante. No entanto, nas bordas do material, os elétrons apresentam uma dinâmica diferente daquela no interior (*bulk*). Como suas órbitas não podem se fechar, os elétrons se movem em órbitas descontínuas ao longo da borda (veja a figura 1.2). Esses “saltos” na borda levam a estados eletrônicos que chamamos de estados de borda. Como o campo magnético determina a direção do movimento dos elétrons, esses estados de borda são quirais (no sentido de que se propagam em uma única direção ao longo da fronteira do material). Não há retroespalhamento, pois o estado de borda que se propaga na direção oposta está localizado no lado oposto da amostra.

A existência desses estados de borda “unidirecionais” (que caracteriza a diferença fundamental entre o estado de Hall quântico e um isolante comum) é um fenômeno topológico. Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs (TKNN), mostraram que o número inteiro N na equação 1.4 está, na verdade, profundamente conectado com o número de Chern [7]. Usando a fórmula de Kubo, foi obtido:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= N \frac{e^2}{h} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi} \int \int dk_x dk_y F_{xy}(\mathbf{k}), \\ F_{xy} &= \frac{\partial A_y(\mathbf{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial A_x(\mathbf{k})}{\partial k_y}, \\ A_j &= i \sum_N \langle u_{n,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_j} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Nas equações acima, $A_j(\mathbf{k})$ é o chamado potencial de Berry para cada uma das N bandas,

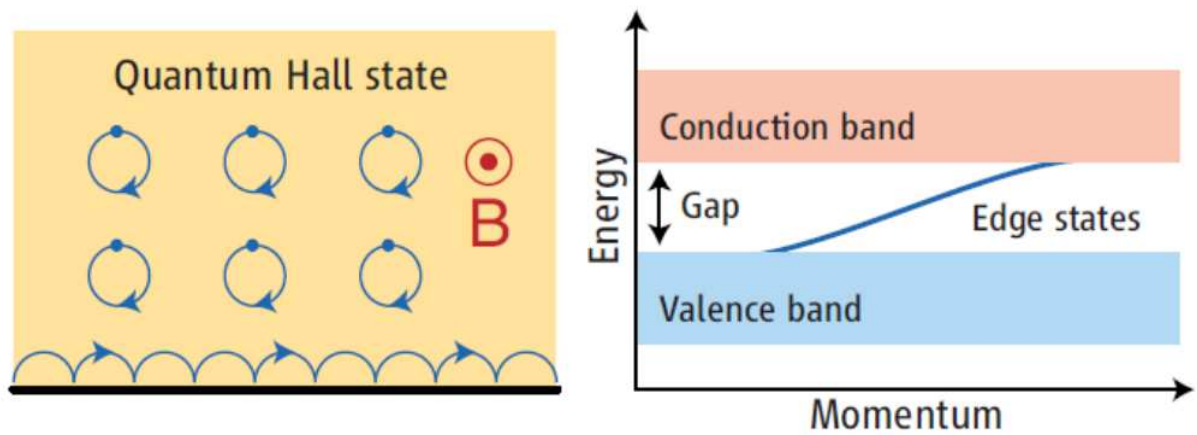


Figura 1.2: Ilustração do efeito Hall quântico. À esquerda, vemos as órbitas eletrônicas que são interrompidas nas bordas. À direita, vemos sua estrutura de banda com um estado metálico de borda dentro do *gap* de energia. Figura retirada de [7].

$F_{xy}(\mathbf{k})$ é a curvatura de Berry, e o número inteiro N corresponde à soma dos números de Chern das bandas de energia preenchidas, de acordo com a equação 1.3. Na figura 1.3, vemos a junção de um material topologicamente não-trivial com número de Chern finito e um trivial com $n = 0$. Como discutimos, para que o invariante topológica mude, você precisa fechar o *gap* na interface.

Embora fases topológicas possam ocorrer de modos bastante distintos (a depender do sistema de física da matéria condensada em questão), nesta tese estamos interessados apenas em modelos de isolantes topológicos (ITs) fortes (boas referências sobre isolantes topológicos e suas classificações são encontradas em [9, 8]). Assumiremos uma estrutura de bandas onde o nível de Fermi reside no *gap*. Noutras palavras, as bandas estão preenchidas até o *gap*, e assim os autoestados ocupados do sistema são simplesmente a banda de valência. Na próxima seção introduziremos brevemente isolantes topológicos e o modelo BHZ que os descreve nesse contexto que colocamos acima.

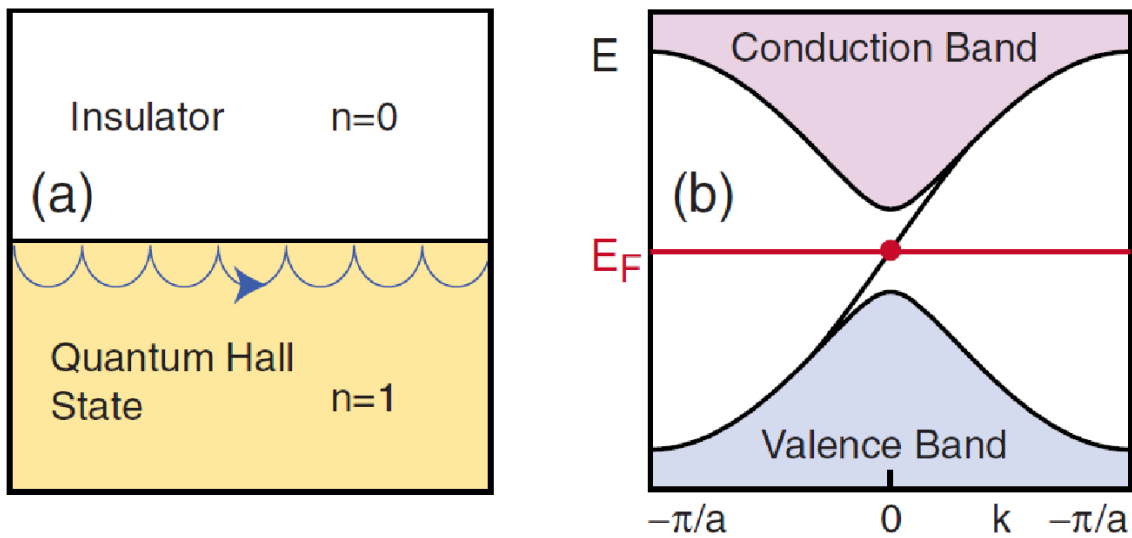


Figura 1.3: À esquerda, vemos a interface entre duas fases topologicamente distintas. À direita, vemos sua estrutura de banda com um estado metálico de borda dentro do *gap* de energia. Figura retirada de [8]

1.3 Isolantes topológicos e o modelo BHZ

Os isolantes topológicos são um estado quântico da matéria que surge da impossibilidade de uma conexão adiabática entre eles e os isolantes/semicondutores convencionais e têm peculiaridade única de serem isolantes no *bulk* e condutores na superfície [9]. Estes estados de superfície são distintos, pois são quirais, contra-propagantes (no sentido de que partículas com estados de spin opostos viajam em direções opostas) e altamente protegidos pela simetria \mathcal{T} contra impurezas não-magnéticas e outras perturbações suficiente suaves que preservem \mathcal{T} . Além disso, o forte acoplamento spin-órbita nestes sistemas produz o chamado *spin-momentum locking* (os portadores nos estados de superfície têm seu spin travado em ângulo reto com seu momento). Dito isso tudo, é natural esperar que os isolantes topológicos sejam bons candidatos para spintrônica: na spintrônica, utiliza-se a diferença de populações de elétrons com spin *up* e *down* para codificar, transportar e processar informação; além de variar apenas a densidade de carga, como na eletrônica convencional, controla-se também o fluxo e os torques de spin [10].

Há muitos outros efeitos que emergem destes sistemas topológicos, como o efeito magnetoeletrônico topológico (EMET), que consiste em uma resposta magnética (elétrica) a um estímulo elétrico (magnético), e também o surgimento de férmions de Majorana em sistemas supercondutores topológicos, que são bons candidatos para computação quântica [11]. Aqui, apresentaremos de modo sucinto o modelo desenvolvido por Bernevig, Hughes e Zhang que descreve isolantes topológicos. Para mais detalhes acerca do desenvolvimento do modelo, cito a referência [4].

Como a condutividade de Hall (e , portanto, o invariante TKNN) não é simétrica sob \mathcal{T} , os estados topologicamente não triviais descritos na seção anterior só podem ocorrer quando a

simetria de reversão temporal é quebrada, seja por um campo magnético externo, seja por outra atuação de ordem magnética. Contudo, Em 2005, um novo fenômeno topológico conhecido como efeito Hall quântico de spin (EHQS) foi previsto por Kane e Mele para ocorrer no grafeno [12]. O EHQS assemelha-se ao seu precursor, mas possui uma origem física distinta: enquanto o EHQ exige a quebra da simetria de reversão temporal para acontecer, o EHQS surge naturalmente a partir do acoplamento spin-órbita (ASO) no *bulk* do material [9]. O ASO manifesta-se de tal modo que os elétrons experienciam uma “força de Lorentz efetiva” e, por isso, costuma-se dizer que o ASO desempenha o papel do campo magnético [11]. A direção dessa força depende do spin do elétron, de modo que elétrons com spins opostos propagam-se em direções opostas ao longo de canais de borda nas fronteiras do material (a figura ilustra 1.4 esse efeito). Daí surge o *spin-momentum locking* que comentamos anteriormente. Devido a essa correlação entre spin e momento, esses estados de borda costumam ser chamados de estados de borda helicais. Em termos gerais, o EHQS corresponde à soma de dois EHQ independentes e de quiralidades opostas, fazendo com que o sistema seja invariante sob \mathcal{T} . Como resultado, a condutância de Hall total é zero, mas a condutância de spin Hall é não-nula.

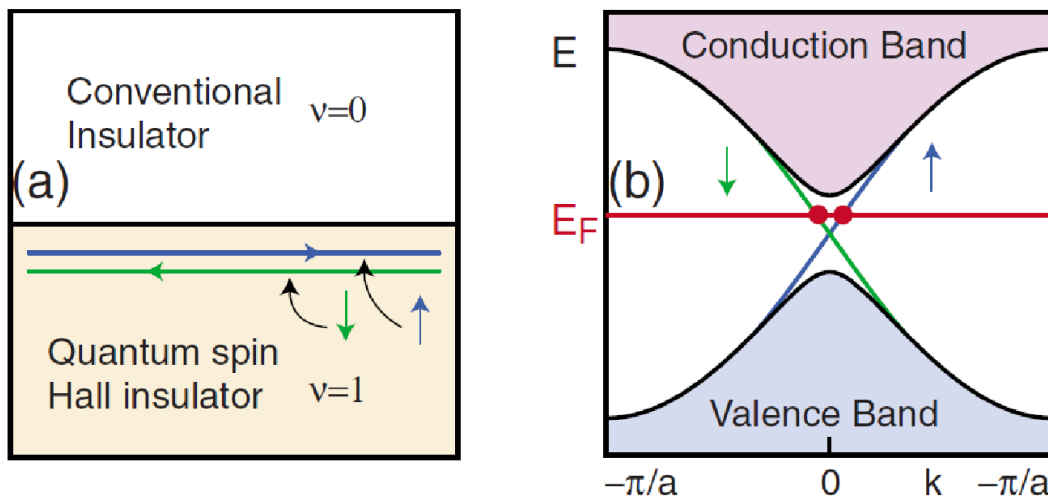


Figura 1.4: Estados de borda no EHQS. A imagem à esquerda mostra a interface entre um EHQS que está em uma fase topológica diferente do vácuo. Surgem estados de borda metálicos spin-polarizados, com os estados orientados à esquerda e à direita conectados pela simetria de reversão temporal. Na imagem à direita, há um esquema de estrutura de banda onde o *gap* de energia do *bulk* e os estados de borda são exibidos. Figura retirada de *kane2011topological*.

O EHQS é comumente chamado de isolante topológico. A Hamiltoniana que descreve esse sistema em baixas energias (em sua versão 3D) é chamada de Hamiltoniana BHZ [13, 14] e é dada por (aqui, estamos considerando um material isotrópico):

$$H(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \mathbf{1}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & Ak_z & 0 & Ak_- \\ Ak_z & -M(\mathbf{k}) & Ak_- & 0 \\ 0 & Ak_+ & M(\mathbf{k}) & -Ak_z \\ Ak_+ & 0 & -Ak_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

onde $M(\mathbf{k}) = m_0 + m_2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$. Os parâmetros podem ser obtidos ajustando o espectro de energia do Hamiltoniano efetivo ao resultado de cálculos *ab initio* para cada material específico [14]. O invariante topológico está relacionado ao termo de massa no Hamiltoniano BHZ [4]: ele tem valor 1 se $\frac{m_0}{m_2} > 0$ (observamos que m_2 é tipicamente negativo, e estamos na fase topológica), e vale zero se $\frac{m_0}{m_2} < 0$ (esse é um caso de fase trivial). Na figura 1.5, mantemos todos os parâmetros constantes, exceto m_0 , e ilustramos a transição de fase topológica. Na tabela 1.1 mostramos alguns valores típicos dos parâmetros para diferentes materiais.

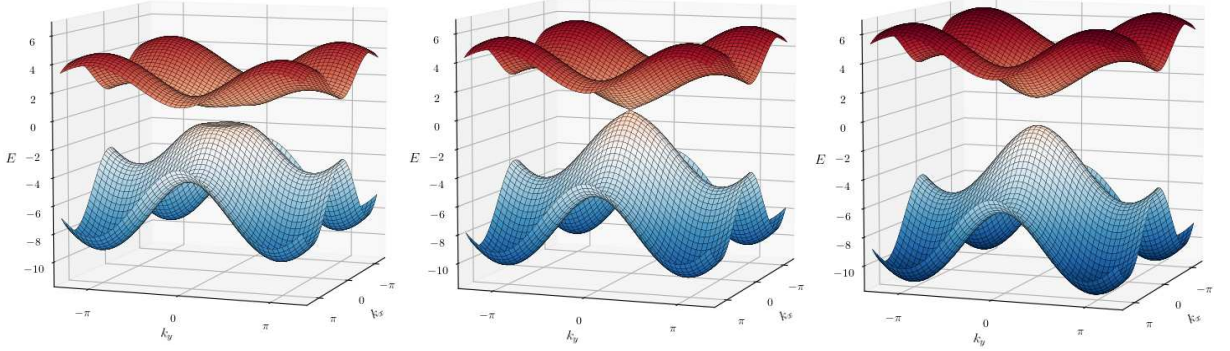


Figura 1.5: À esquerda: $m_0 = -1$, há um gap e esta é uma fase isolante topológica. No centro: $m_0 = 0$, ocorre o fechamento do gap, e este é o ponto de transição de fase. À direita: $m_0 = 1$, há um gap e esta é uma fase isolante topológica.

Podemos estudar os estados de borda dessa Hamiltoniana projetando-a na superfície. No caso de um isolante topológico forte, obtemos uma Hamiltoniana de borda tipo-Dirac para férmions sem massa (se quebrássemos a simetria de reversão temporal, teríamos uma equação para férmions massivos) [9]:

$$H_D = -iA\sigma \cdot \nabla,$$

onde a matriz de Pauli $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é proporcional ao spin físico, e o parâmetro A é proporcional à velocidade de Fermi dos portadores de carga. Os estados de superfície do isolante topológico tridimensional possuem um espectro linear.

	$A(\text{eV \AA})$	$m_2(\text{eV \AA}^2)$	$m_0(\text{eV \AA})$
Bi_2Se_3	2.26 – 3.33	6.86 – 44.5	0.28
Bi_2Te_3	0.30 – 2.87	2.79 – 57.38	0.30
Sb_2Te_3	0.84 – 3.40	19.64 – 48.51	0.22

Tabela 1.1: Valores típicos dos parâmetros físicos para alguns cristais na fase isolante topológico [9, 8].

1.4 Nanopartículas de Isolantes Topológicos

Efeitos interessantes podem aparecer quando confinamos isolantes topológicos espacialmente. O estudo de sistemas quanticamente confinados leva a uma nova classe de objetos chamados pontos quânticos (PQs). A característica marcante desses objetos é a discretização de suas energias (veja Fig 1.6), que emerge naturalmente do confinamento espacial nas três dimensões, e por causa disso eles são chamados de “átomos artificiais”. Pontos quânticos feitos de semicondutores, por exemplo, são de grande interesse, já que o *gap* de energia (e, portanto, o espectro de emissão/absorção) pode ser controlado ajustando o tamanho do material (ver fig 1.7). Pontos quânticos são aplicados em uma gama de sistemas, incluindo diodos emissores de luz feitos de pontos quânticos (QLEDs), sistemas fotovoltaicos, marcadores fluorescentes para aplicações em imageamento biológico, etc [15].

A assinatura única dos pontos quânticos (níveis de energia discretos) pode ser reproduzida em isolantes topológicos por um processo de miniaturização. Deste processo surgem os pontos quânticos de isolante topológico (PQIT) ou as nanopartículas de isolante topológico (NPIT). Esta é uma área da física relativamente nova, mas já se sabe que os isolantes topológicos podem ser miniaturizados até cerca de 10 nm sem a abertura de um *gap* na superfície [16, 17] (ou seja, sem a destruição da natureza topológica dos estados).

Na referência [18], Imura et al. investigaram um isolante topológico esférico e o modelo que foi utilizado é aplicável a nanopartículas de isolantes topológicos. Eles demonstraram que para essas nanopartículas, o espectro dos estados de superfície é discreto, de modo que a característica dos pontos quânticos fica impressa nas nanopartículas, além de estados de superfície protegidos, que são resistentes à perturbações não magnéticas (características de ITs).

Além disso, Siroki et al. mostraram na referência [19] que para uma NPIT esférica sob a influência da luz, um único elétron em um estado de superfície topologicamente protegido gera uma densidade de carga superficial semelhante à um plásmon que pode atuar como uma camada protetora, que aumenta/diminui a absorção óptica dependendo da frequência da luz incidente (na prática, esse plásmon aparece como um pico extra no coeficiente de absorção). Além disso, esse sistema pode acoplar fônons e luz, dando origem a uma espécie de poláriton topológico.

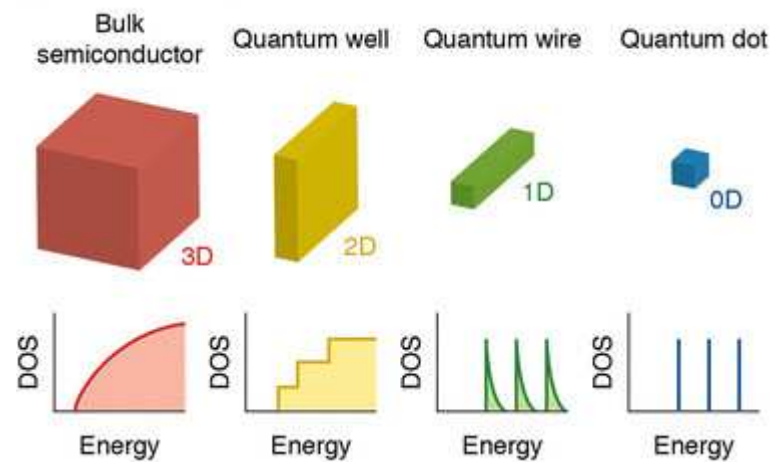


Figura 1.6: Ilustração dos níveis de energia de um semiconductor 3D e de nanoestruturas semicondutoras com redução na dimensionalidade, sendo a 2D denominada “poço quântico”, a 1D denominada “fio quântico” e a 0D “ponto quântico”. A curva de densidade de estados por energia indica o número de estados disponíveis por nível de energia. Note que conforme reduzimos a dimensionalidade, a continuidade desses estados disponíveis fica comprometida, ou seja, apenas alguns estados de energia são permitidos. Fonte: <https://link.springer.com/article/10.1007/s41061-016-0060-0/figures/2>.

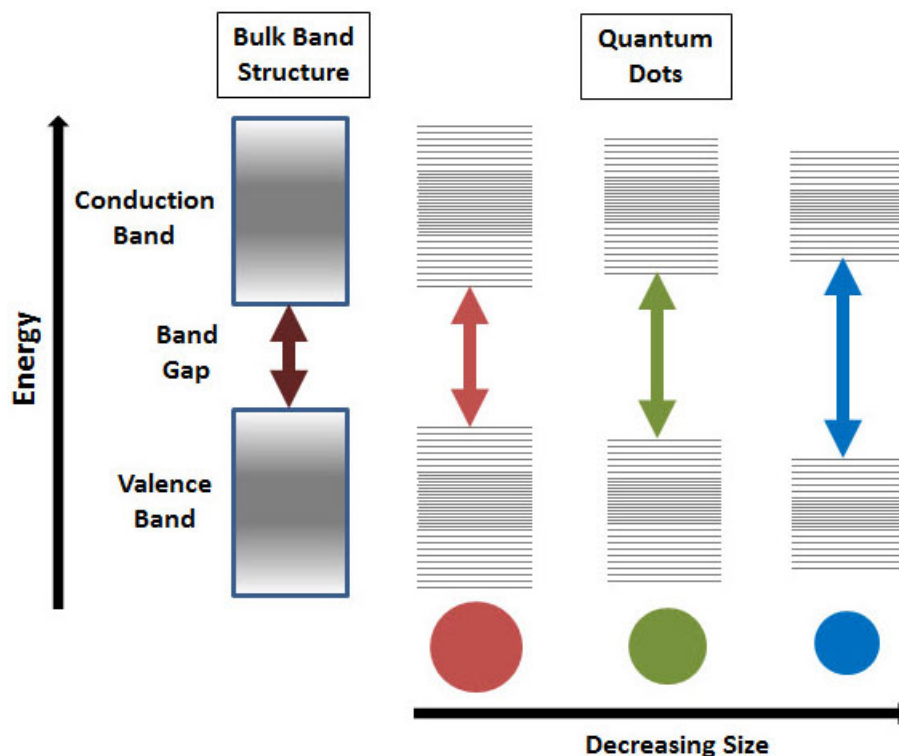


Figura 1.7: Níveis de energia para um semiconductor sob o efeito do confinamento quântico. O *gap* aumenta com a diminuição do tamanho do e, portanto, temos um deslocamento para o azul. Além disso, notamos a discretização nas energias dos pontos quânticos quando comparados ao semiconductor fora do regime de confinamento. Fonte: <https://www.sigmaaldrich.com/technicaldocuments/articles/materials-science/nanomaterials/quantum-dots.html>.

1.5 Motivações para os trabalhos

Como vimos, os estados de superfície em um isolante topológico com simetria de reversão temporal preservada são descritos por uma equação tipo-Dirac para férmions sem massa. Se estamos lidando com uma geometria curva, devemos acoplar a equação de Dirac ao sistema de coordenadas e isso pode levar a fenômenos interessantes. Neste contexto, pode-se pensar na geometria cônica, pois é uma escolha peculiar devido à não-trivialidade de sua ponta. Do ponto de vista da geometria diferencial, o cone tem uma curvatura Gaussiana nula em todos os pontos, exceto na ponta onde a curvatura cresce indefinidamente. Essa peculiaridade da geometria cônica (que é uma propriedade local) pode gerar efeitos globais. Por exemplo, no trabalho da Ref. [20], foi mostrado que de para um IT cônico com quebra de simetria \mathcal{T} , a singularidade da ponta induz uma polarização elétrica geométrica, que depende apenas do ângulo do abertura do cone. Inspirado nesse trabalho, investigamos o impacto da geometria cônica nos estados de superfície e no espectro, bem como as consequências na distribuição das partículas pelo cone e possíveis aplicações. Os resultados e discussões são apresentados no Capítulo 2.

Outra geometria que nos chama muita atenção é a geometria toroidal, onde temos uma curvatura variável, assumindo valores positivos na região externa que vai diminuindo continuamente passando por zero até chegar a valores negativos na região interna. Esta variação contínua da curvatura Gaussiana ao longo da superfície toroidal oferece um laboratório único para investigar como a curvatura local afeta os estados topológicos de superfície. Na Ref. [21] foram estudados os modos de zero energia num IT toroidal. Além disso, a geometria toroidal oferece um ambiente interessante para investigar os plásmons de natureza topológica que comentamos na seção anterior. Dado que no caso esférico (com curvatura constante) o plásmon induzido se manifesta na adição de um pico no coeficiente de absorção, podemos intuir que a curvatura variável do toro geraria mais picos (associados às diferentes regiões de curvatura). Discussões e resultados sobre essas questões são apresentados no Capítulo 3.

Capítulo 2

Nanopartícula cônica de isolante topológico

O desenvolvimento e alguns dos principais resultados deste capítulo foram publicados em (Veiga, L.G., Moura-Melo, W.A. Surface states and breaking down of spin-to-surface locking on a conical topological insulator quantum dot. Eur. Phys. J. B 95, 178 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-022-00424-8>) [22].

2.1 A geometria do cone

O cone tem curvatura e torção nulas em todos os pontos de sua superfície, exceto na ponta, onde possui uma singularidade. Assim, com exceção de sua ponta, a superfície de um cone pode ser descrita por coordenadas esféricas, onde identificamos que um ângulo polar constante leva a uma superfície cônica, como ilustrado na Figura 2.1.

Identificando as coordenadas $x_1 = r, x_2 = \phi, x_3 = \theta$, os vetores tangentes à superfície são definidos como

$$\mathbf{e}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_i} \text{ onde } i = 1, 2, \quad (2.1)$$

e o vetor normal à superfície é:

$$\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2}{|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2|} \quad (2.2)$$

Usando o vetor posição em coordenadas esféricas $\mathbf{x} = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$, onde $\theta = \text{constante}$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \\ \mathbf{e}_2 &= (-r \sin \theta \sin \phi, r \sin \theta \cos \phi, 0) \\ \mathbf{e}_3 &= (-\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, \sin \theta) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Para simplificar a notação, adotaremos as identificações $\sin \theta \equiv \alpha, \cos \theta \equiv \beta$. Para encontrar o tensor métrico, definimos \mathbf{e}^i tal que $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}^j = \delta_{ij}$, então o tensor métrico, $g_{ij} \equiv \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$, é lido

abaixo:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \alpha^2 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

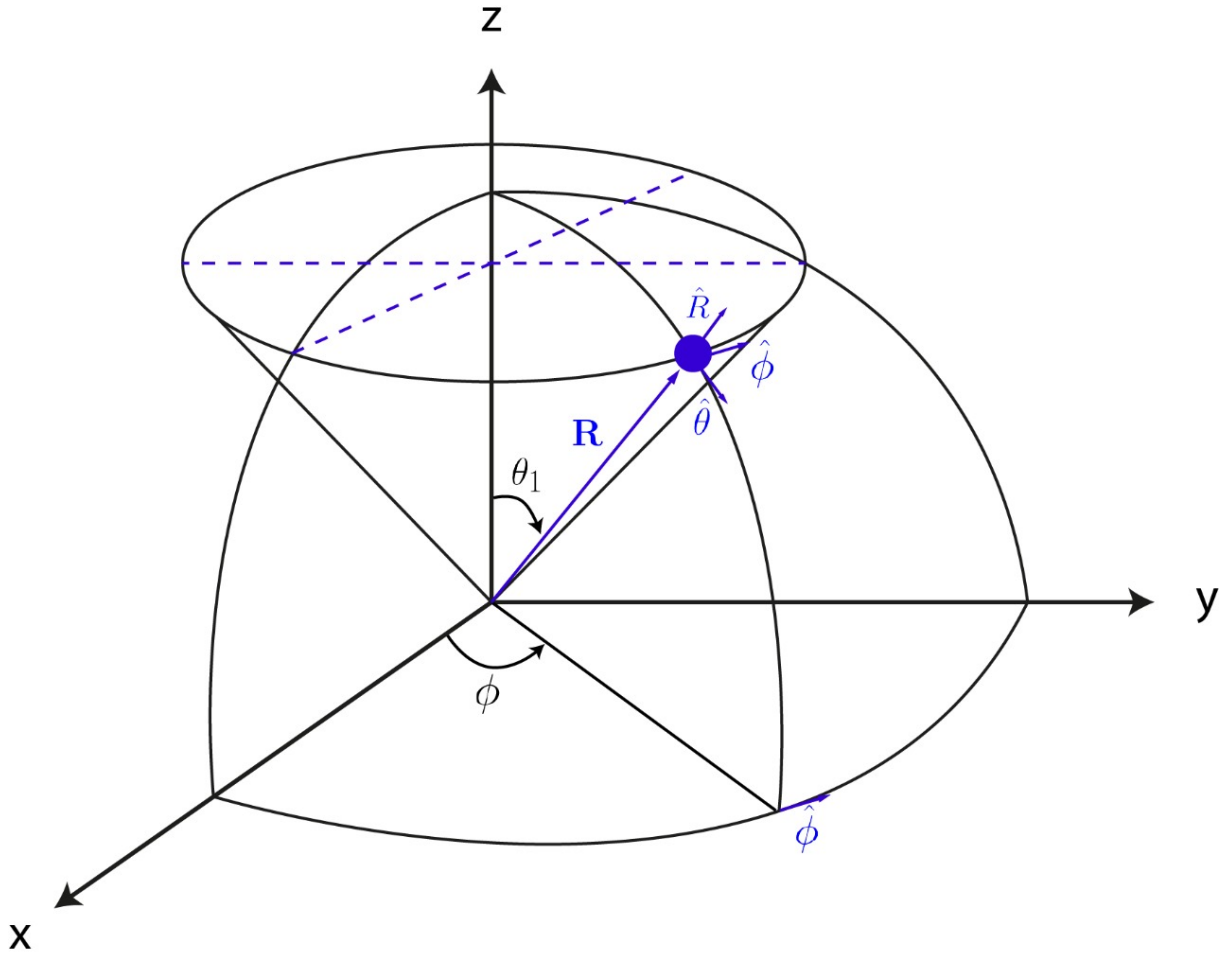


Figura 2.1: Um cone é gerado fixando-se o ângulo polar em coordenadas esféricas, $\theta = \theta_1$, enquanto a linha geratriz do cone é a coordenada radial. No texto, definimos $\sin \theta = \alpha$, e escreveremos as propriedades do nosso sistema de isolante topológico em termos desta quantidade.

2.2 Os estados de superfície e suas energias

Sabemos que a projeção do Hamiltoniano dado pela equação 1.6 na superfície do material leva à uma equação tipo-Dirac. Também sabemos que, quando estamos trabalhando em espaços curvos, precisamos acoplar a equação de Dirac à geometria do espaço. Na referência [23], os autores desenvolveram uma abordagem generalizada para o modelo BHZ em coordenadas curvilíneas arbitrárias. Seguindo esse procedimento, obtivemos o operador de Dirac efetivo para um isolante topológico cônico (detalhes no Apêndice A).

Qualquer estado de borda nesse sistema $|\psi\rangle$ pode ser representado como uma combinação linear de $|+\rangle$ e $|-\rangle$ (veja a equação A.5), onde esses autoestados formam uma base de autoes-

tados para o Hamiltoniano do *bulk*. Temos

$$|\Psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle. \quad (2.5)$$

O operador de borda efetivo para o espinor $a = \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix}$, é dado por:

$$H_{\text{sur}} = \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{D}_+ \\ \mathcal{D}_- & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

onde

$$\mathcal{D}_{\pm} = \mp A \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right) + \frac{iA}{\alpha r} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (2.7)$$

Algumas observações são pertinentes: primeiro, o acoplamento $\partial_r \rightarrow \partial_r + \frac{1}{2r}$ surge naturalmente para operadores de Dirac em um espaço curvo [24]. Esse termo está relacionado à conexão de spin, que acopla adequadamente a equação de Dirac ao espaço onde estamos trabalhando. Além disso, o termo multiplicando o operador $\partial\phi$ pode ser visto como um potencial efetivo induzido pela curvatura não trivial do cone. Isso é semelhante ao efeito Aharanov-Bohm gravitacional descrito em sistemas de cosmologia e física de partículas [25, 20].

Para encontrar os estados de superfície e suas energias, devemos resolver

$$H|a\rangle = E|a\rangle, \quad (2.8)$$

que é equivalente a

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathcal{D}_+ \\ \mathcal{D}_- & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_+(r, \phi) \\ a_-(r, \phi) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a_+(r, \phi) \\ a_-(r, \phi) \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

Como o hamiltoniano acima comuta com o momento angular total de um sistema Dirac 2D

$$\mathcal{J} = -i \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \sigma_z, \quad (2.10)$$

escrevemos os estados de superfície como autofunções de \mathcal{J} com autovalores $j + \frac{1}{2}$, e eles assumem a forma:

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} u(r) \\ iv(r) \end{bmatrix} e^{i\phi(j + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma_z)} = \begin{bmatrix} u(r)e^{i\phi j} \\ iv(r)e^{i\phi(j+1)} \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Aplicando o operador de Dirac a este estado, obtém-se:

$$\begin{cases} -iA \left(\partial_r + \frac{1}{2r} \right) v(r) - \frac{iA(j+1)}{\alpha r} v(r) = Eu(r) \\ A \left(\partial_r + \frac{1}{2r} \right) u(r) - \frac{Aj}{\alpha r} u(r) = iEv(r) \end{cases} \quad (2.12)$$

As equações acima podem ser desacopladas como abaixo:

$$r^2 \frac{d^2 v(r)}{dr^2} + r \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right) \frac{dv(r)}{dr} + (r^2 k^2 - \lambda_{j+}^2) v(r) = 0, \quad (2.13)$$

$$r^2 \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + r \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right) \frac{du(r)}{dr} + (r^2 k^2 - \lambda_{j-}^2) u(r) = 0, \quad (2.14)$$

onde $k^2 = \frac{E^2}{A^2}$ e $\lambda_{j\pm}^2 = \frac{j(j+1)}{\alpha^2} \pm \frac{j}{\alpha} \pm \frac{1}{2\alpha} + \frac{1}{4}$.

Temos uma solução espinorial de dois componentes para energias positivas e negativas cada, mas como as soluções $-E$ são as soluções espelho de E (mais detalhes no Apêndice A), focamos apenas nas energias positivas aqui. As duas equações tipo Bessel acima podem ser transformadas na equação de Bessel com a seguinte identificação:

$$\begin{bmatrix} u(r) \\ v(r) \end{bmatrix} \rightarrow r^{-\frac{1}{2\alpha}} \begin{bmatrix} u(r) \\ v(r) \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Com esta identificação, as soluções do componente radial do espinor de superfície são:

$$\begin{bmatrix} u(r) \\ v(r) \end{bmatrix} = Cr^\rho \begin{bmatrix} J_{\nu_{j-}}(kr) \\ J_{\nu_{j+}}(kr) \end{bmatrix}, \quad (2.16)$$

onde C é uma constante de normalização, $\rho = -\frac{1}{2\alpha}$ e $\nu_{j\pm}^2 = \lambda_{j\pm}^2 + \frac{1}{4\alpha^2} = \left[\frac{1}{\alpha} \left(j + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \right]^2$.

Para garantir a normalizabilidade em para pequenos valores da função de Bessel para energias positivas, i.e, $\nu_{j\pm} = + \left[\frac{1}{\alpha} \left(j + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \right]$, devemos impor uma condição sobre os valores de j . Como $J_\nu(z) \rightarrow \infty$ quando $z \rightarrow 0$ para $\nu < 0$ se ν não é inteiro (que é o caso aqui), devemos escolher apenas valores não negativos de j . Por outro lado, para as energias negativas, $\nu_{j\pm} = - \left[\frac{1}{\alpha} \left(j + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \right]$ devemos escolher apenas valores negativos para j .

Numa primeira análise, vamos estudar o comportamento dos estados para pontos próximos à ponta do cone. Para isso, expandimos a Eq. 7 em pequenos argumentos da função de Bessel:

$$\begin{bmatrix} u(r) \\ v(r) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} E^{\nu_{j-}} r^{\rho + \nu_{j-}} \\ E^{\nu_{j+}} r^{\rho + \nu_{j+}} \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

A equação acima implica uma rica textura de spin ao redor da ponta do cone. Por exemplo, para estados com $j = 0$, a componente up do spin domina para pequenos valores de r e temos $u(r) \approx r^{-1/\alpha - 1/2}$. Esse comportamento se assemelha ao resultado clássico para densidades de carga elétrica em regiões agudas (o chamado “poder das pontas”). Para estados excitados com $j > 0$, a distribuição de spin dependerá naturalmente do ângulo de abertura com $u(r) \approx r^{-1/\alpha + j - 1/2}$ e $v(r) \approx r^{-1/\alpha + j + 1/2}$. A amplitude para $j=0$ é consideravelmente maior, pois partículas com menor momento angular tendem a se acumular mais ao redor da ponta. Além disso, à medida que aumentamos o ângulo de abertura, a amplitude das componentes

diminui, o que significa que os efeitos da curvatura são maiores em cones mais estreitos.

Agora, para trabalharmos no regime de ponto quântico, devemos fixar um raio finito ao cone. Fazer isso é equivalente a impor que não há fluxo fermiônico para fora do ponto cônico, i.e, $a_+(R, \phi) + ie^{-i\phi}a_-(R, \phi) = 0$, que leva a

$$J_{\nu_{j-}}(kR) - J_{\nu_{j+}}(kR) = 0. \quad (2.18)$$

Da condição de contorno acima encontramos a restrição $k = \frac{\zeta_{j,n}}{R}$, onde $\zeta_{j,n}$ é o n -ésimo zero de $J_{\nu_{j-}}(z) - J_{\nu_{j+}}(z)$. Assim, as energias positivas permitidas tornam-se:

$$E_{j,n} = A \frac{\zeta_{j,n}}{R} = \text{onde } j \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}. \quad (2.19)$$

A identificação da finitude do cone naturalmente produziu energias discretas, imprimindo a assinatura do confinamento quântico. Além disso, o parâmetro geométrico é intrínseco nas energias, pois está presente nos termos $\nu_{j\pm}$. É instrutivo comparar as energias para diferentes ângulos do cone. Na figura 2.2 comparamos as energias dos dois estados mais baixos para cones de 15° , 30° , 45° e 60° . Intuitivamente, a energia deve ser maior quanto menor o ângulo de abertura para o mesmo R , pois isso representa, sob à luz da seção 1.4, um confinamento mais forte.

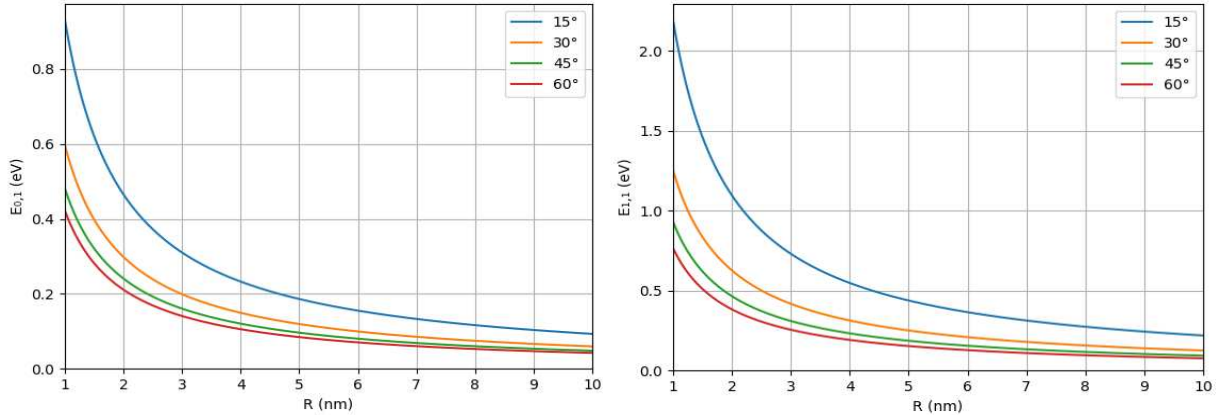


Figura 2.2: Energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente, em função do raio geratriz do cone para diferentes ângulos de abertura. Ângulos mais baixos correspondem a energias mais altas.

A solução completa para os estados de superfície é então:

$$|a_{j,n}(r, \phi)\rangle = C_{j,n} r^\rho \begin{bmatrix} J_{\nu_{j-}}\left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r\right) e^{i\phi j} \\ i J_{\nu_{j+}}\left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r\right) e^{i\phi(j+1)} \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

A constante de normalização para cada estado pode ser encontrada com:

$$\int (|u(r)|^2 + |v(r)|^2) \alpha r dr d\phi = 1, \quad (2.21)$$

e a substituição da equação (7) leva a

$$2C_{j,n}^2 \alpha \pi \int_0^R r^{2\rho+1} \left[J_{\nu_{j+}} \left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r \right)^2 + J_{\nu_{j-}} \left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r \right)^2 \right] dr = 1. \quad (2.22)$$

Abaixo, plotamos a densidade de probabilidade para diferentes ângulos de abertura e diferentes estados como um mapa de calor na superfície do cone. Ao variar o ângulo de abertura do cone, observamos diretamente como a curvatura modifica os estados. Esses mapas de calor permitem comparar, de forma intuitiva, a intensidade e o alcance do "campo" geométrico para diferentes modos (j, n) :

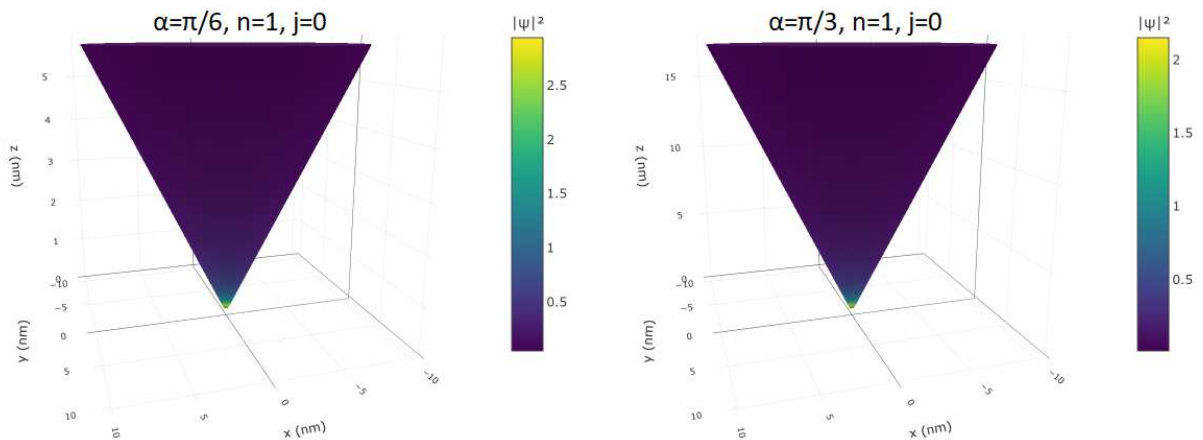


Figura 2.3: Comparação de $|\psi|^2$ para cones de 30° e 60° no estado fundamental. Para valores baixos de momento angular, em ambos os casos os estados se concentram ao redor da ponta. Esse comportamento é análogo ao acúmulo de cargas em regiões pontiagudas no contexto de eletromagnetismo clássico.

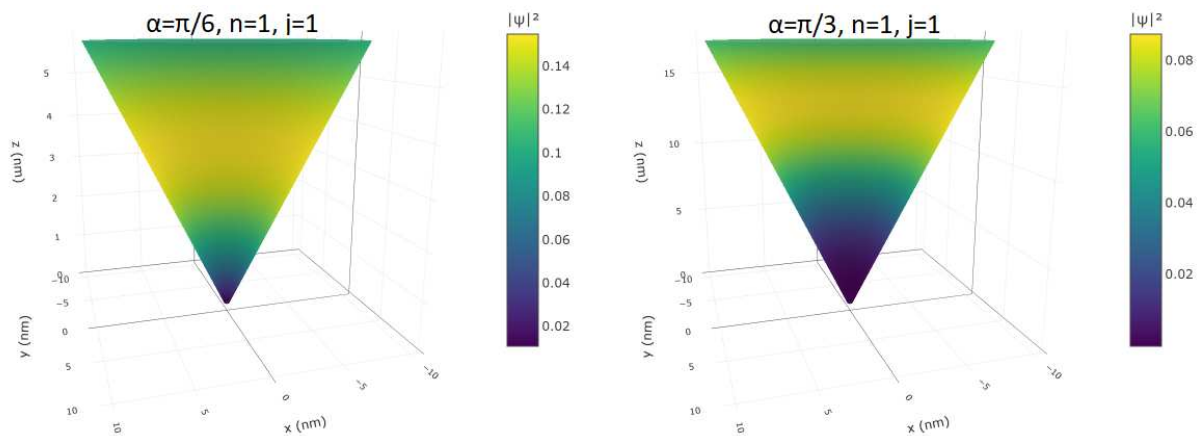


Figura 2.4: Comparação de $|\psi|^2$ para cones de 30° e 60° no primeiro estado excitado. A função de onda tende a se espalhar pelo cone conforme o momento angular das partículas aumenta.

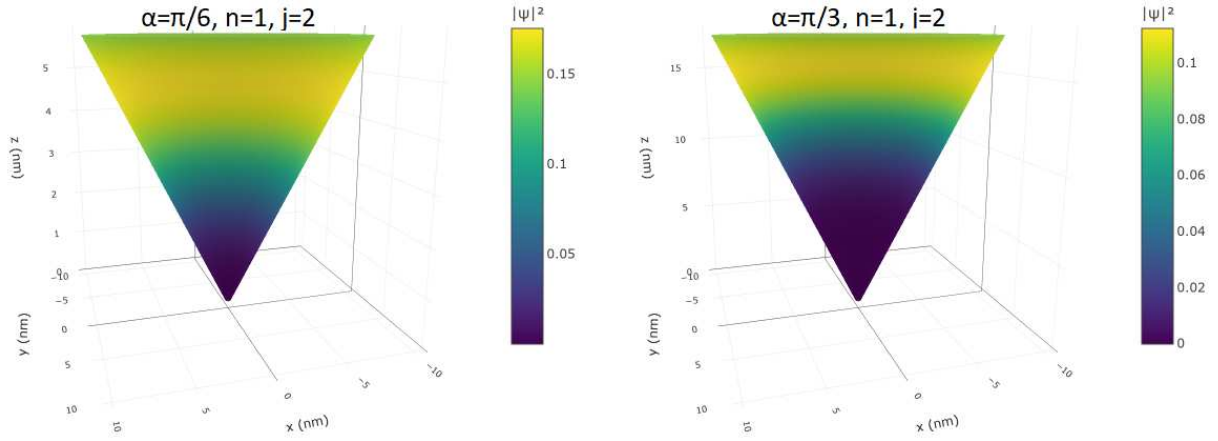


Figura 2.5: Comparação de $|\psi|^2$ para cones de 30° e 60° para $n = 1$ e $j = 2$. Para maiores valores de momento angular, a função de onda tende a se concentrar na base do cone. Se aumentamos o momento angular, mas mantemos o momento radial constante, a “força centrífuga” vence a tendência dos estados de se concentrarem na ponta.

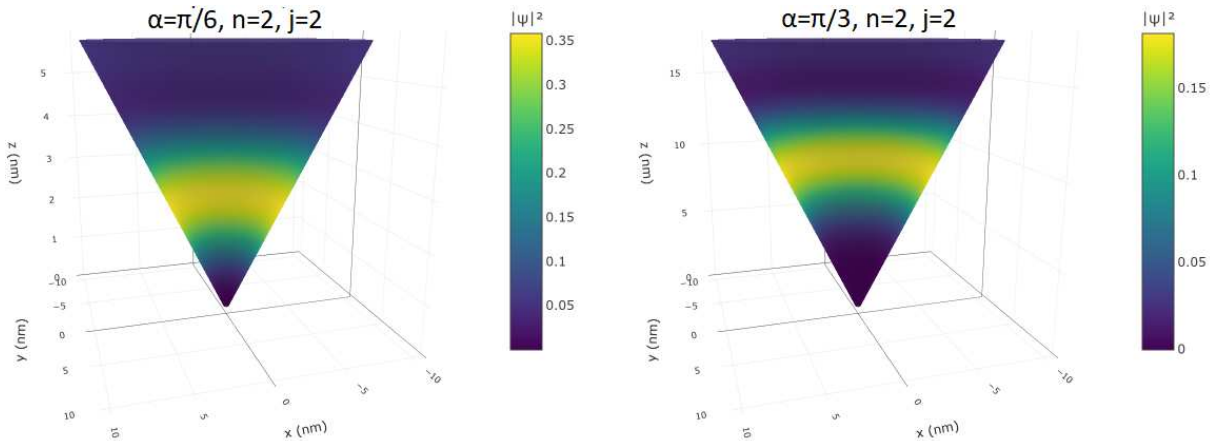


Figura 2.6: Comparação de $|\psi|^2$ para cones de 30° e 60° para $n = 2$ e $j = 2$. Aumentar o valor de n cria uma competição entre os efeitos e faz a função de onda tende a se concentrar em outros valores de r . Começamos a ver “franjas de interferência” sendo formadas.

Nesse sistema, os estados de superfície são “atraídos” em direção à ponta do cone, devido ao fator $r^{2\rho}$ com $\rho = -1/(2\alpha) < 0$. Quanto mais agudo o cone (menor α), maior $|\rho|$ e mais intensa a concentração de $|\psi|^2$ na região de curvatura máxima. Para estados com $j = 0$, essa atração geométrica não encontra oposição e garante localização quase exclusiva na ponta. Já para $j > 0$, a “barreira centrífuga” efetiva $\lambda_{j\pm}^2/r^2$ afasta o máximo da densidade para longe da ponta. As ordens das funções de Bessel crescem com j , deslocando os picos para valores maiores de r . Além disso, devido ao confinamento radial, observamos o surgimento de $(n - 1)$ nós quando aumentamos o número quântico n (podemos imaginar que os estados “refletem” nas extremidades radiais do cone). Com isso, temos a formação de anéis concêntricos onde a soma incoerente $|J_{\nu-}|^2 + |J_{\nu+}|^2$ gera uma espécie de padrão de interferência, como observamos na figura abaixo onde temos um estado bastante energético com $n = 6, j = 6$. O comportamento

rico dos estados de superfície é o resultado da competição a geometria não trivial da superfície cônica e o confinamento.

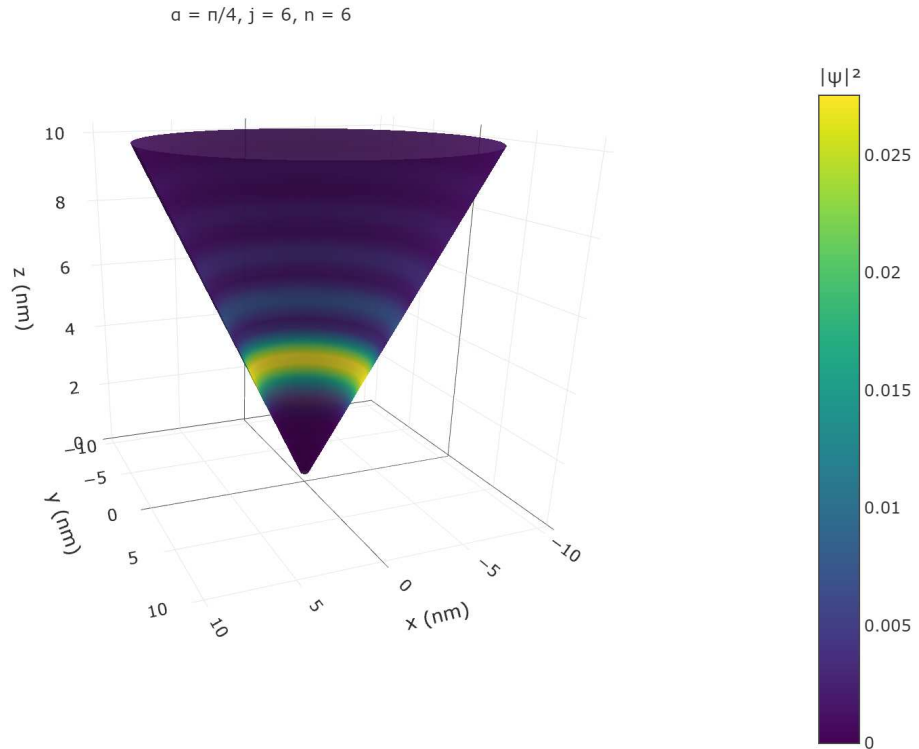


Figura 2.7: Distribuição da densidade de probabilidade para $n = 6, j = 6$. Aqui, vemos claramente uma estrutura similar a franjas de interferência, resultado da competição entre a tendência dos estados de se localizar na ponta do cone e a repulsão criada para grandes valores de momento angular.

Agora, com os estados já caracterizados, estudemos como o componente de spin para fora da superfície se comporta. Sabe-se que geralmente o spin está preso na superfície de um isolante topológico, devido ao *spin-momentum locking*. No entanto, nas Refs [26, 27] foi mostrado que a curvatura induz uma magnetização efetiva cujo torque tende a induzir projeção de spin fora da superfície. De fato, este é precisamente o efeito estudado na Ref [20], em que este fluxo tipo-“Aharonov-Bohm” leva a um descompasso entre os componentes spin *up* e *down* após um transporte paralelo ao redor da ponta do cone, produzindo uma polarização geométrica que depende apenas do ângulo de abertura cônica (para um isolante topológico coberto com um filme magnético fino). Calculamos o valor esperado para o componente de spin fora da superfície para um estado arbitrário $|j, n\rangle$ para obter:

$$\langle \sigma^3 \rangle = C_{j,n}^2 \alpha r^{2\rho} \left[J_{\nu_{j-}} \left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r \right)^2 - J_{\nu_{j+}} \left(\frac{\zeta_{j,n}}{R} r \right)^2 \right] \quad (2.23)$$

Daí, nota-se que, de modo geral, $\nu_{j+} \neq \nu_{j-}$, então tal valor é não-nulo, indicando que há componentes de spin fora do plano da superfície cônica. Esse efeito é a chamada quebra do

spin-to-surface locking, que também ocorre para um ponto quântico de IT cilíndrico [28]. Vale notar que, na literatura, existe um certo desalinhamento nessa nomenclatura. Nas referências [28, 18], os autores se referem ao *spin-to-surface locking* como sinônimo do *spin-momentum locking*. Aqui, uso essa nomenclatura para deixar claro que o spin e o momento dos portadores de carga ainda são ortogonais, porém agora podemos ter uma projeção para fora do plano onde os portadores de carga se movimentam.

Calculamos explicitamente $\langle \sigma^3 \rangle$ para os dois primeiros níveis e diferentes ângulos de abertura nas Figuras 2.8 e 2.9. Em ambas as imagens há componente de spin fora da superfície quebrando o *spin-to-surface locking*. Observamos na Eq. 2.23 que a diferença de fase entre os componentes do espinor aumenta com o ângulo de abertura. Os gráficos abaixo mostram isso, onde a amplitude do componente de spin projetado fora do plano aumenta muito do cone de 30° para o cone de 60° . A magnitude do componente de spin projetado é significativamente maior para o estado fundamental comparado ao estado excitado. Podemos atribuir isso ao fato de que no estado fundamental os portadores de carga são mais prováveis de serem encontrados ao redor da ponta, portanto a intensidade do “torque” exercido pelo campo efetivo é maior.

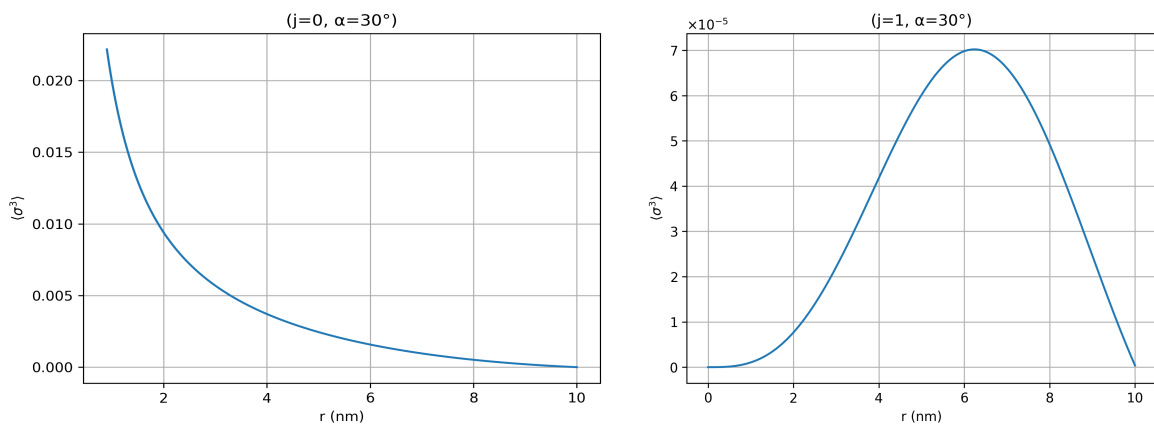


Figura 2.8: Valor esperado para o componente de spin normal à superfície do cone para os estados fundamental e excitado, respectivamente, com $\alpha = 30^\circ$. Note que para próximo à ponta do cone, a amplitude da projeção do spin para fora do plano cresce muito no estado fundamental, em que os estados se concentram ali. Para o estado excitado, a magnitude é muito baixa, porém não-nula.

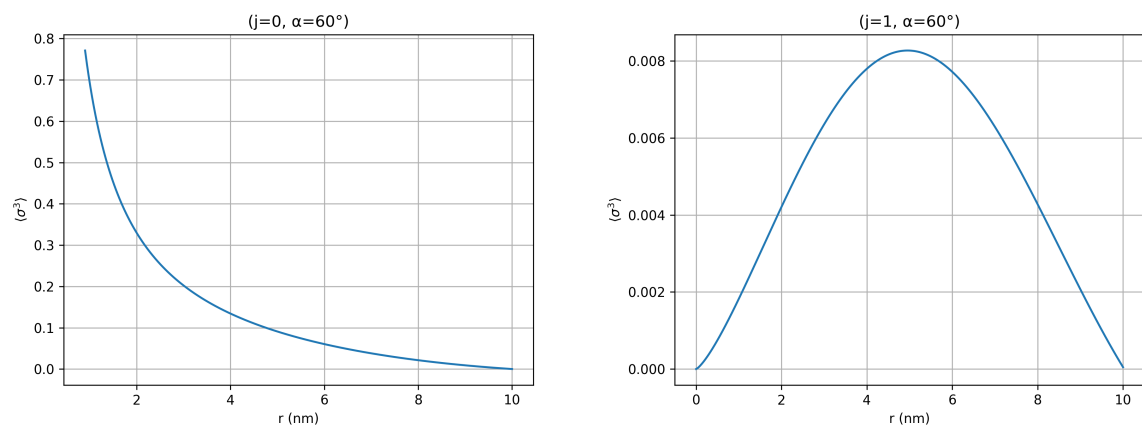


Figura 2.9: Valor esperado para o componente de spin normal à superfície do cone para os estados fundamental e excitado, respectivamente, com $\alpha = 60^\circ$. Observamos um comportamento análogo ao caso anterior, mas com amplitudes maiores.

Capítulo 3

O isolante topológico toroidal

3.1 Aspectos básicos da geometria toroidal

Como discutimos no primeiro capítulo, no caso do toro temos uma curvatura variável que assume valores positivos (na região externa) e valores negativos (na região interna). Essas características despertam o interesse nessas geometrias tanto do ponto de vista do desenvolvimento de física básica quanto em possíveis aplicações. Podemos classificar o toro de diferentes maneiras de acordo com a relação entre seus raios interno (r) e externo (R): se $r > R$, temos um toro que contém auto-interseção no eixo z ; se $r = R$, temos um toro chamado de *horn torus*, que é tangente a si mesmo na origem; se $r < R$, temos um *ring torus*, que é o que estamos interessados.

Uma parametrização clássica para o toro consiste em estender as coordenadas esféricas do seguinte modo, conforme ilustrado na Figura 3.1 (note que existem muitas parametrizações diferentes, e usaremos outra mais a frente):

$$\begin{cases} x = (R + r \sin \theta) \cos \phi, \\ y = (R + r \sin \theta) \sin \phi, \\ z = r \cos \theta. \end{cases} \quad (3.1)$$

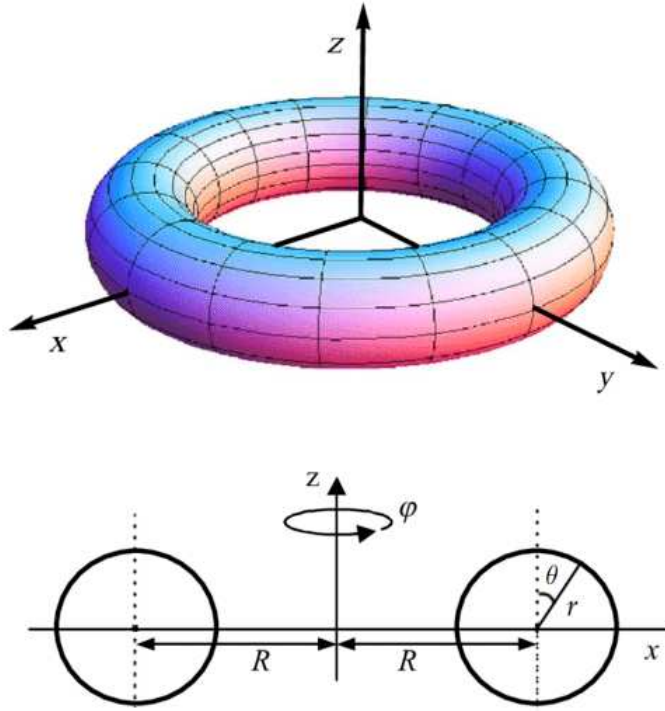


Figura 3.1: Um corte mostrando as coordenadas do toro, $(\theta, \phi) \in [0, 2\pi)$, e os raios interno e externo, r e R .

A curvatura Gaussiana do toro é dada por

$$K_{\text{toro}} = \frac{\sin \theta}{r(R + r \sin \theta)}, \quad (3.2)$$

e podemos identificar as linhas de curvatura nula em $\theta = 0$ e π , a região de curvatura máxima em $\theta = \pi/2$ e a região de curvatura mínima em $\theta = 3\pi/2$.

3.2 Sobre a dinâmica na superfície do toro

Através de um desenvolvimento análogo ao descrito no Apêndice A, o Hamiltoniano efetivo de Dirac que atua nos portadores de carga na superfície de um isolante topológico toroidal foi encontrado na referência [20]. A Hamiltoniana que descreve a dinâmica das partículas na superfície é dada por:

$$\mathcal{H}_s = A \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\mathcal{D}}_+ \\ \tilde{\mathcal{D}}_- & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

onde

$$\tilde{\mathcal{D}}_{\pm} = \mp \frac{\partial_{\theta}}{r} \mp \frac{1}{2} \frac{\cos \theta}{R + r \sin \theta} + \frac{i}{R + r \sin \theta} \partial_{\phi}. \quad (3.4)$$

Note que a conexão de spin, $\Gamma_\theta = \frac{1}{2} \frac{\cos\theta}{R+r\sin\theta}$, aparece como um potencial vetor efetivo, $\vec{A} = \Gamma_\theta \hat{\phi}$, gerada por uma distribuição efetiva de carga magnética devido à curvatura do toro. De fato, essa distribuição seria análoga a um anel de cargas magnéticas, situado no plano xy com raio R . No caso do isolante topológico esférico, o potencial efetivo que surge devido à curvatura pode ser pensado como um potencial de um monopolo magnético centrado na origem [18]. Logo, resolver a equação de Dirac efetiva nesses casos é análogo à descrever a dinâmica de férmions de massa nula na presença de campos magnéticos devido à distribuições de cargas magnéticas. Na referência [21], os autores discutem ainda sobre modos de energia nula que aparecem no toro induzidos por esse potencial efetivo.

Como extensão desse trabalho, começamos por resolver os estados de superfície e o espectro de energia desse sistema, caracterizando os estados de superfície por completo. Nosso objetivo é resolver o problema de autovalores:

$$\mathcal{H}_s \psi(\theta, \phi) = E \psi(\theta, \phi), \quad (3.5)$$

com condições de contorno periódicas na função de onda total:

$$\psi(\theta, \phi) = \psi(\theta + 2\pi, \phi) = \psi(\theta, \phi + 2\pi). \quad (3.6)$$

Novamente, expressamos o espinor em termos das componentes:

$$\psi = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle. \quad (3.7)$$

Na equação acima, os $\alpha_{m+}(\theta)$ atuam na componente de spin *up* e os $\alpha_{m-}(\theta)$ atuam na componente de spin *down*. Aqui, temos condições de contorno anti-periódicas:

$$\alpha_\pm(\theta, \phi + 2\pi) = \alpha_\pm(\theta + 2\pi, \phi) = -\alpha_\pm(\theta, \phi). \quad (3.8)$$

Sempre que um portador de carga cujo spin “mora” na superfície completa um caminho fechado ao longo de um dos ângulos do toro uma fase é acumulada. Ao tentarmos girar o spin em 2π , ψ acumula uma fase π . Daí surge a anti-periodicidade nas condições de contorno.

Assumindo-se separação de variáveis, as soluções serão da forma:

$$\alpha(\theta, \phi) = e^{im\phi} \begin{pmatrix} \alpha_{m+}(\theta) \\ \alpha_{m-}(\theta) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

onde m representa a componente azimutal do momento angular assumindo valores semi-inteiros, $m = \pm \frac{N}{2}$ com N ímpar.

Após a separação das variáveis, o sistema de equações diferenciais se desacopla em uma

equação de segunda ordem para cada componente. Obtemos

$$\left[\frac{1}{(\rho + \sin \theta)} \frac{d}{d\theta} (\rho + \sin \theta) \frac{d}{d\theta} - \frac{\sin \theta}{2(\rho + \sin \theta)} - \frac{1}{(\rho + \sin \theta)^2} \left(m + \frac{\sigma}{2} \cos \theta \right)^2 + \varepsilon^2 \right] \alpha_{m\sigma} = 0, \quad (3.10)$$

onde definimos $\sigma = \pm$, $\varepsilon = rE/A$, e $\rho = R/r$.

Essa equação, em geral, não tem resolução analítica, mas podemos reescrevê-la de maneira mais conveniente e estudar diferentes regimes de solução. Começamos fazendo a transformação

$$\alpha_{m\sigma}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\rho + \sin \theta}} v(\theta) \quad (3.11)$$

para obter uma equação de Sturm-Liouville:

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \varepsilon^2 - \frac{m^2 + \sigma m \cos \theta}{(\rho + \sin \theta)^2} \right] v(\theta) = 0. \quad (3.12)$$

Podemos reescrever a equação acima como

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \varepsilon^2 + V_{\pm}(\theta) \right] v(\theta) = 0, \quad (3.13)$$

onde

$$V_{\pm}(\theta) = -\frac{m^2 \pm m \cos \theta}{(\rho + \sin \theta)^2} \quad (3.14)$$

é um potencial efetivo, com V_+ atuando na componente *up* e V_- atuando na componente *down*. A seguir, vemos alguns comportamentos desse potencial efetivo para diferentes configurações.

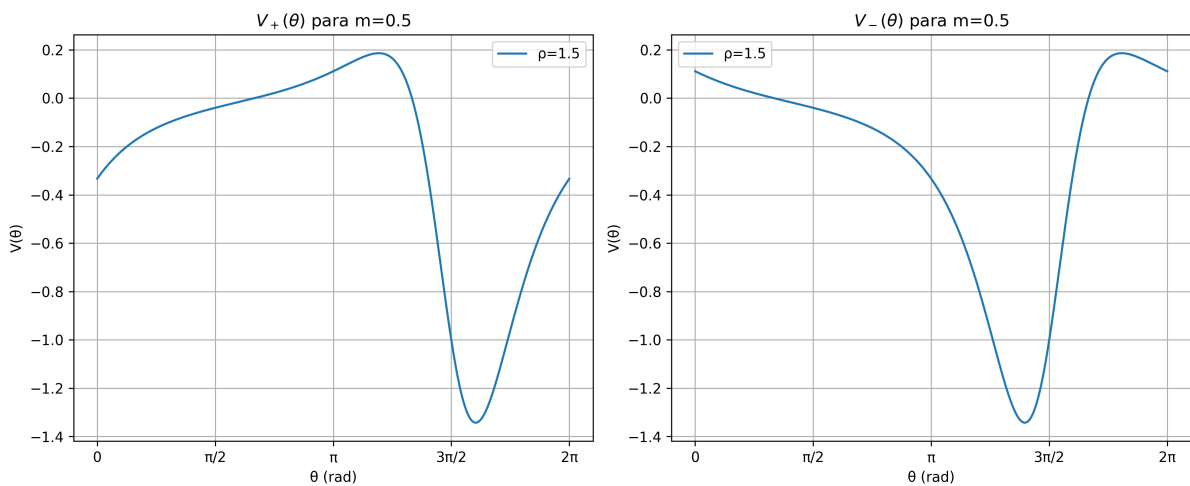


Figura 3.2: Potenciais efetivos para ambas componentes para $m = 0.5, \rho = 1.5$. Para pequenos valores de m e ρ , o potencial é fortemente modulado pelas funções trigonométricas. Note que o mínimo do potencial em ambas as componentes está em torno da região de menor curvatura do toro.

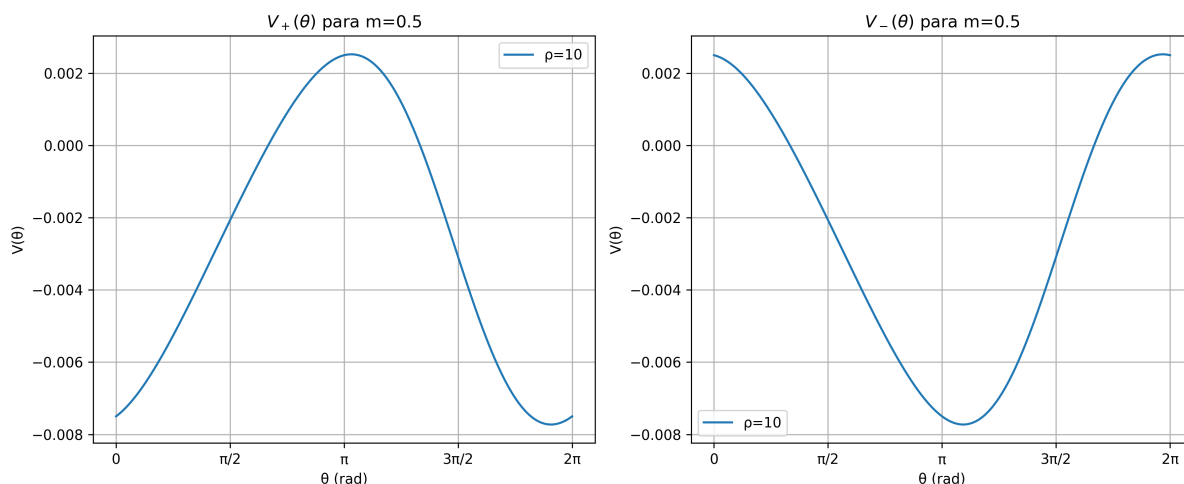


Figura 3.3: Potenciais efetivos para ambas componentes para $m = 0.5, \rho = 10$. Para maiores valores de ρ , o denominador tem menor impacto na modulação do potencial e ele fica mais sensível ao termo oscilatório do numerador.

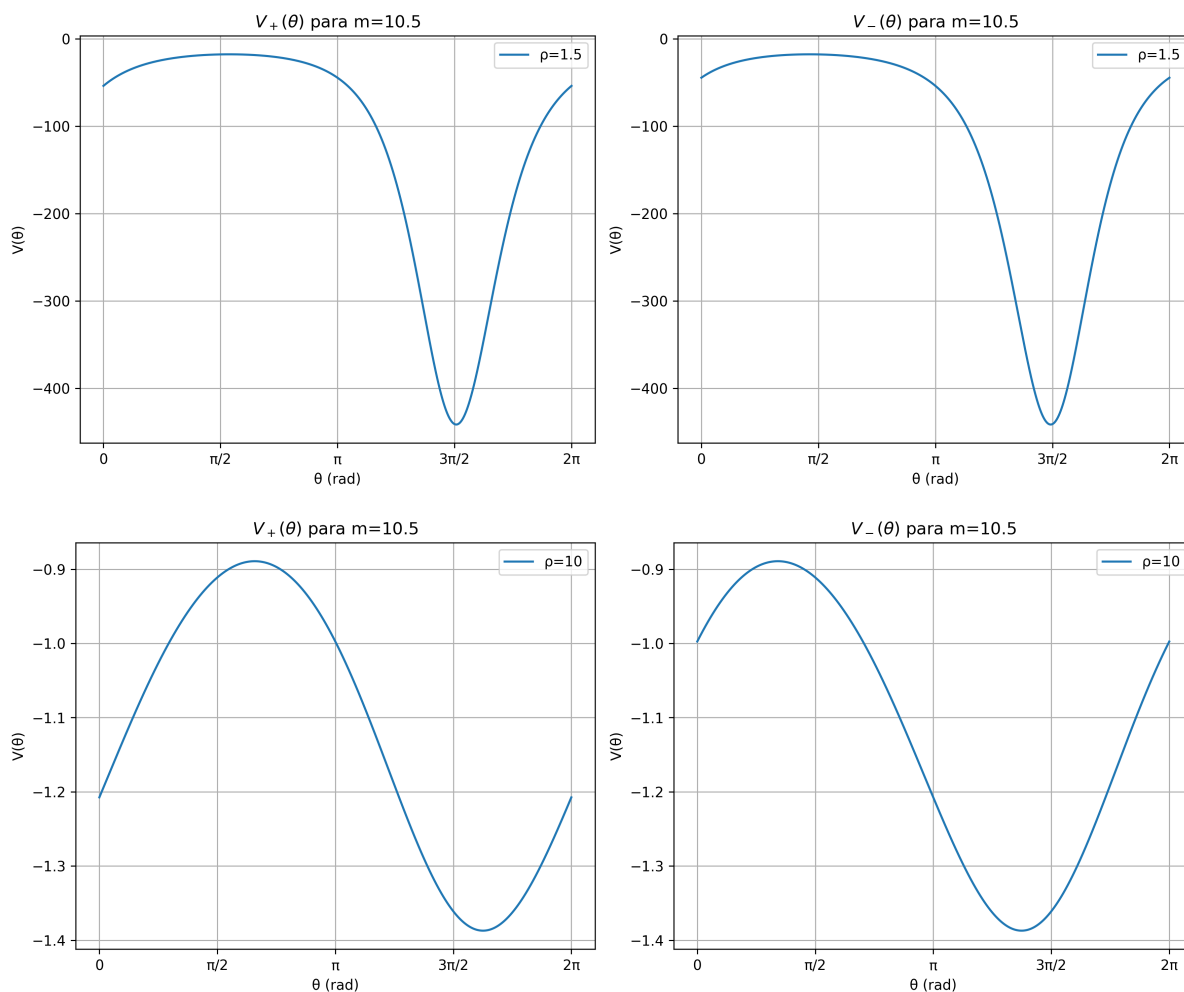


Figura 3.4: Potenciais efetivos para ambas componentes para $m = 10.5, \rho = 1.5, \rho = 10$. Para valores grandes de m , o termo oscilatório do numerador perde força e o potencial deixa de ser assimétrico para as diferentes componentes.

Em regiões onde $V(\theta)$ é menor, o “poço” efetivo é mais profundo e a função de onda tende a se localizar ali. Os valores de m controlam a amplitude do termo $\cos\theta$, mudando profundidade e posição dos poços. Para grandes valores de m , o termo m^2 domina o numerador da equação 3.14, e $V_{\pm}(\theta) \approx -\frac{m^2}{(\rho \pm \sin\theta)^2}$, removendo a assimetria entre o potencial efetivo para as diferentes componentes. Se ρ cresce indefinidamente (no limite de um anel muito fino) e m tem um valor pequeno, o potencial efetivo torna-se muito pequeno e as partículas basicamente oscilam ao redor do toro livremente. Porém, se temos $\rho \sim \frac{|m|}{|\epsilon|} \gg 1$ (no limite de um toro fino, mas ainda mantendo as propriedades da geometria), então $V_{\pm}(\theta) \approx -\frac{m^2 \pm m \cos\theta}{\rho^2}$ e a equação se torna

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \epsilon^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \mp \frac{m \cos\theta}{\rho^2} \right] v(\theta) = 0. \quad (3.15)$$

Fazendo a mudança de variável

$$\theta = 2x, \quad v(\theta) = y(x), \quad (3.16)$$

e multiplicando a equação original por 4 obtém-se:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + 4\epsilon^2 y - \frac{4m^2}{\rho^2} y - \frac{4\sigma m}{\rho^2} \cos(2x) y = 0. \quad (3.17)$$

Identificando-se os parâmetros:

$$a = 4\left(\epsilon^2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right), \quad q = \frac{2\sigma m}{\rho^2}, \quad (3.18)$$

chegamos à forma padrão da equação de Mathieu [29]:

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) + (a - 2q \cos 2x) y = 0. \quad (3.19)$$

Essa equação aparece em muitos sistemas quânticos oscilatórios. Por exemplo, o “pêndulo quântico” tem sua dinâmica regida por uma equação de Mathieu [30]:

$$\frac{d^2}{dv^2} \Psi(v) + (a - 2q \cos 2v) \Psi(v), \quad (3.20)$$

onde $\theta = 2v$, $p = \frac{4E}{\hbar^2/2ml^2}$, $q = -\frac{2mgl}{\hbar^2/2ml^2}$. Nesse limite, então, a dinâmica no toro é análoga à de um pêndulo sujeito à um “campo gravitacional” $g' = \frac{1}{\rho^2}$, que atrai ou repele dependendo do valor de σ .

3.2.1 Estados de superfície e espectro para o caso geral

Retornando para o caso geral dado pela equação 3.13, resolvemos o problema numericamente para caracterizar os estados. Aqui, utilizamos uma discretização por diferenças finitas na variável $\theta \in [0, 2\pi)$, repartindo esse intervalo em N pontos com passo $h = 2\pi/N$. A segunda derivada $\frac{d^2v}{d\theta^2}$ é aproximada em

$$\left. \frac{d^2v}{d\theta^2} \right|_{\theta_j} \approx \frac{v_{j+1} - 2v_j + v_{j-1}}{h^2},$$

com condições de contorno antiperiódicas. O potencial efetivo

$$V_{\pm}(\theta_j) = -\frac{m^2 \pm m \cos \theta_j}{(\rho + \sin \theta_j)^2}$$

entra como termo diagonal. Montamos uma matriz $H \in \mathbb{R}^{N \times N}$ que, no limite contínuo, corresponderia ao operador $-\partial_{\theta}^2 + V(\theta)$. Em seguida, usamos a função `eigsh` do SciPy [31] para extrair os autovalores λ_{nm} de H . Esses satisfazem

$$H v_{nm} = \lambda_{nm} v_{nm} \quad \implies \quad \frac{d^2 v_{nm}}{d\theta^2} + (\epsilon_{nm}^2 - V(\theta)) v_{nm} = 0,$$

onde $\epsilon_{nm} = \sqrt{|\lambda_{nm}|}$. Assim obtemos numericamente o espectro de energias $\{\epsilon_{nm}\}$ e, a partir dos autovetores v_{nm} , reconstruímos e normalizamos as funções $\alpha_{nm\pm}(\theta)$. Note que, diferentemente do cone, aqui não precisamos discutir sobre o tamanho do toro para quantizar os estados: como as coordenadas do toro são cíclicas (em outras palavras, são compactas), o espectro é naturalmente discreto. A seguir mostraremos algumas funções $\alpha_{nm\pm}(\theta)$ e da distribuição de probabilidade $|\psi(\theta)|^2$ em função do ângulo θ , para diferentes valores de m, ρ e n .

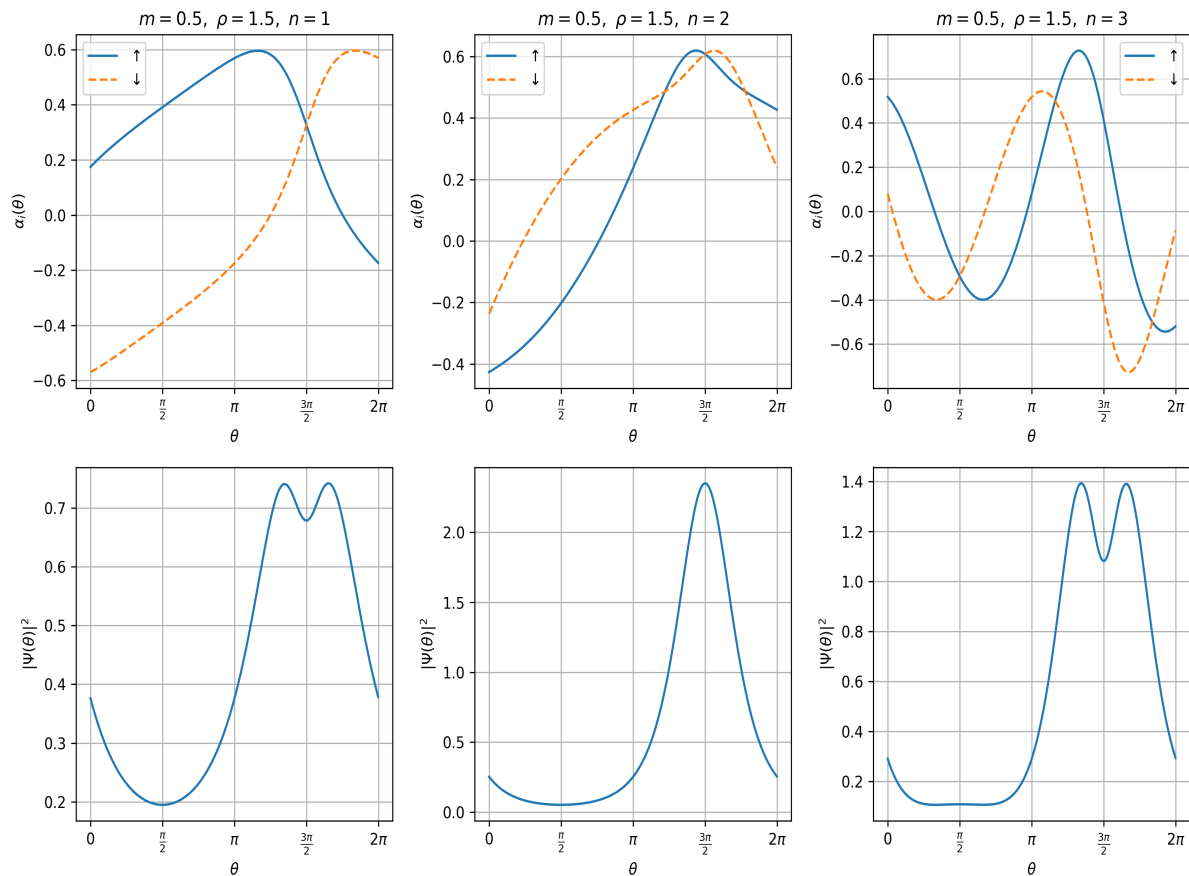


Figura 3.5: $\alpha_{m\pm}(\theta)$ e $|\psi(\theta)|^2$ com $m = 0.5$ e $\rho = 1.5$ para diferentes valores de n . Como discutimos anteriormente, para pequenos valores de m e ρ , o potencial é fortemente modulado pelas funções trigonométricas. Note que os portadores de carga tendem a se acumular na região de menor curvatura do toro nesse caso, que é onde o mínimo do potencial efetivo se encontra. Além disso, a densidade de probabilidade atinge um mínimo na região de máxima curvatura $\theta = \pi/2$.

Na figura acima, temos m pequeno e ρ pequeno. Nesse caso, o denominador do potencial efetivo tem bastante influência: a distribuição de partículas tende a se concentrar em torno de $\theta = \frac{3\pi}{2}$, onde o denominador (e conseqüentemente o potencial efetivo) tem valor mínimo. Do mesmo modo, temos um mínimo na distribuição de partículas na região ao redor de $\theta = \frac{\pi}{2}$, onde o denominador atinge seu máximo e o potencial também.

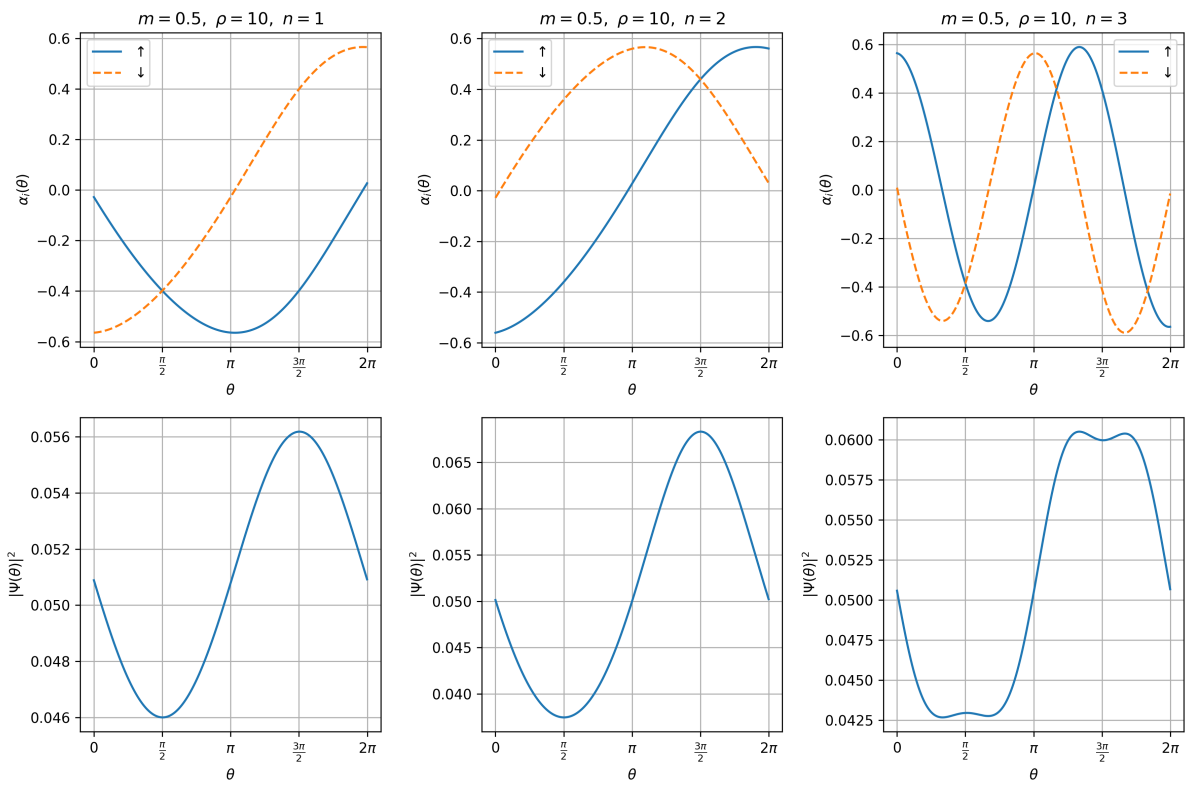


Figura 3.6: $\alpha_{m\pm}(\theta)$ e $|\psi(\theta)|^2$ com $m = 0.5$ e $\rho = 10$ para diferentes valores de n . O potencial ainda mantém as partículas ao redor de $\theta = \frac{3\pi}{2}$ e longe de $\theta = \frac{\pi}{2}$.

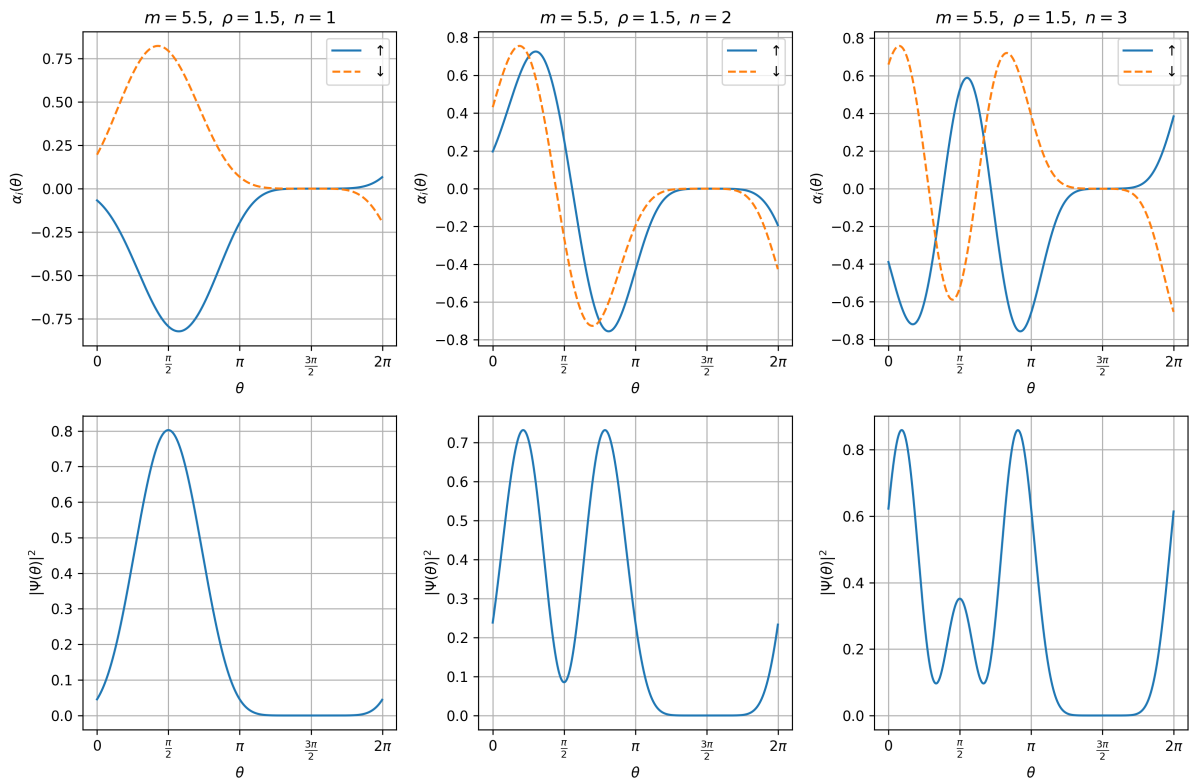


Figura 3.7: $\alpha_{m\pm}(\theta)$ e $|\psi(\theta)|^2$ com $m = 5.5$ e $\rho = 1.5$ para diferentes valores de n .

Olhemos para o estado fundamental na figura acima. Aqui, m já assume um valor grande o suficiente para o termo m^2 no numerador da equação 3.14 dominar. O potencial efetivo é quase o mesmo para as duas componentes, e a ortogonalidade entre $(\alpha_+, 0)$ e $(0, \alpha_-)$ acaba, na prática, impondo que, $\alpha_-(\theta)$ seja proporcional a $-\alpha_+(\theta)$. Para valores maiores de n temos a adição de nós (sob a luz do teorema da oscilação de Sturm [32]) e a estrutura dos estados fica mais complexa. Abaixo, mostramos mapas de calor que ilustram essa estrutura de estados e a competição entre os diferentes parâmetros.

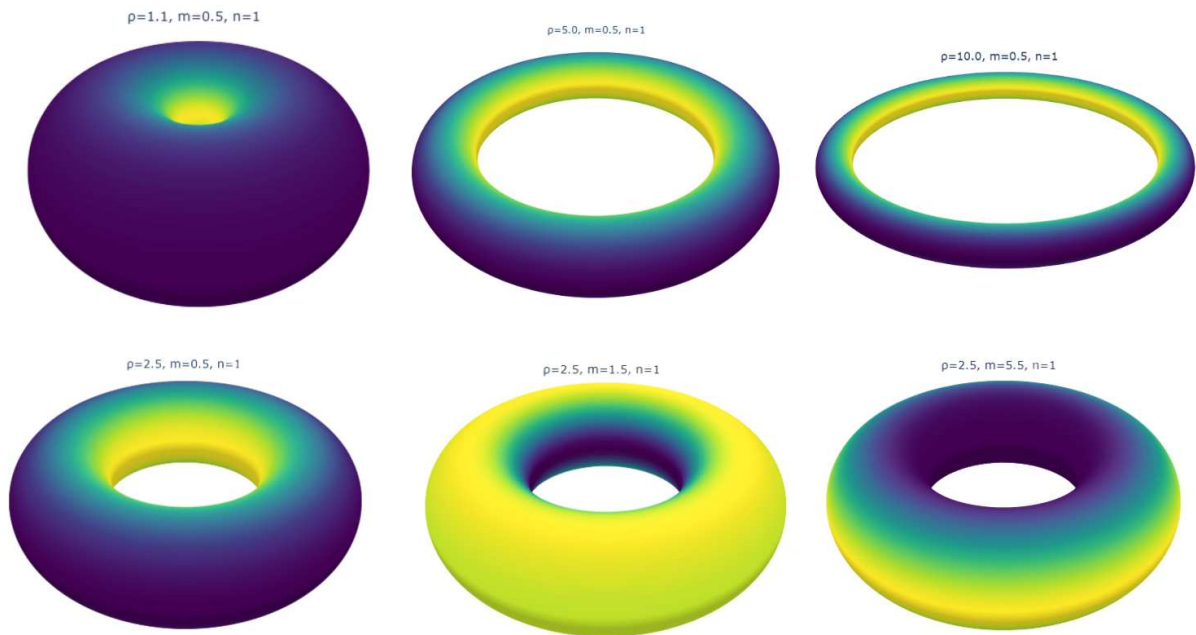


Figura 3.8: Distribuição de estados na superfície toroidal. Na linha superior, mantemos m e n constantes e variamos ρ . Na linha inferior, mantemos ρ constante e variamos o momento angular.

Na linha superior, mantemos m e n constantes e variamos ρ . Para torus espessos e com baixas energias, os estados se acumulam na linha central, onde temos um mínimo de potencial. No limite de torus fino, os estados tendem a se uniformizar na superfície (pois não há mais curvatura gerando potencial geométrico). Na linha inferior, mantemos ρ constante e variamos o momento angular. Vemos uma espécie de força centrífuga, assim como no caso cônico, tendendo a espalhar os estados para a região de maior raio.

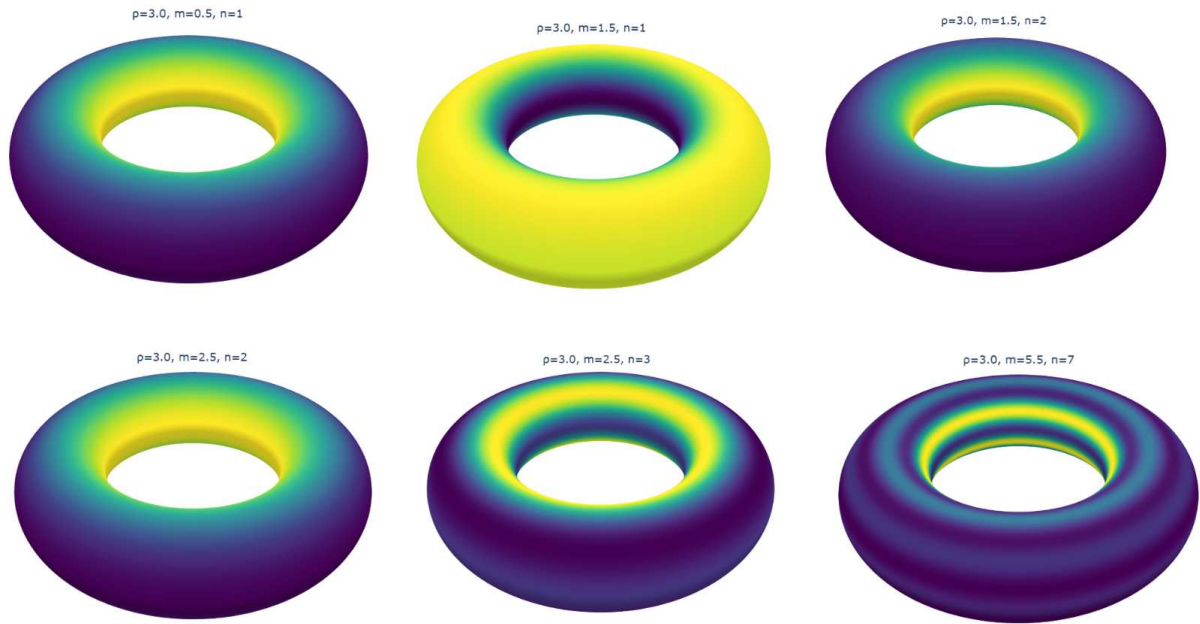


Figura 3.9: Miscelânea de efeitos na distribuição de estados na superfície toroidal. Variamos os parâmetros de energia simultaneamente. O momento angular azimutal tende a expulsar os estados para a região de maior raio e a energia associada ao ângulo θ tende a confinar os estados na região central. O resultado é um padrão tipo interferência, análogo também ao caso cônico.

Abaixo, temos alguns valores de energia $E_{n,m} = \epsilon_{n,m} \frac{A}{r}$ ($A = 3 \times 10^{-10} \text{ eV} \cdot \text{m}$, $r = 10 \text{ nm}$) para uma nanopartícula toroidal, usando valores de A típicos para Bi_2Se_3 :

n	E [eV]
1	0.026730
2	0.043143
3	0.058785
4	0.071123
5	0.087439
6	0.093195
7	0.115111
8	0.116373
9	0.143090
10	0.143288

Tabela 3.1: Energias para $\rho = 1.5, m = 1.5$

n	E [eV]
1	0.015441
2	0.015894
3	0.045227
4	0.045228
5	0.075136
6	0.075136
7	0.105096
8	0.105096
9	0.135072
10	0.135072

Tabela 3.2: Energias para $\rho = 10, m = 1.5$

Diferentemente do caso esférico, onde as energias de cada nível são igualmente espaçadas [18], percebemos que, a partir de um certo nível, os autovalores de energia para pares de níveis sucessivos são muito próximos. Em um primeiro momento, podemos refletir se isso não é um erro numérico ou alguma flutuação de precisão no código. Porém, vemos que o mesmo efeito ocorre ao se resolver a equação de Pauli para uma partícula carregada de spin $1/2$ forçada a se mover ao longo de uma superfície toroidal [33]. A geometria toroidal e consequentemente

o potencial que é induzido na equação de movimento gera esse comportamento anômalo nos níveis de energia. Quando aumentamos o valor de ρ , a diferença de energia desses pares fica muito pequena e é imperceptível com a quantidade de números decimais que estamos usando.

Na figura abaixo, plotamos as energias $E_{n,1.5}$ em função de ρ , e vemos claramente os pares que ficam cada vez mais próximos conforme ρ cresce.

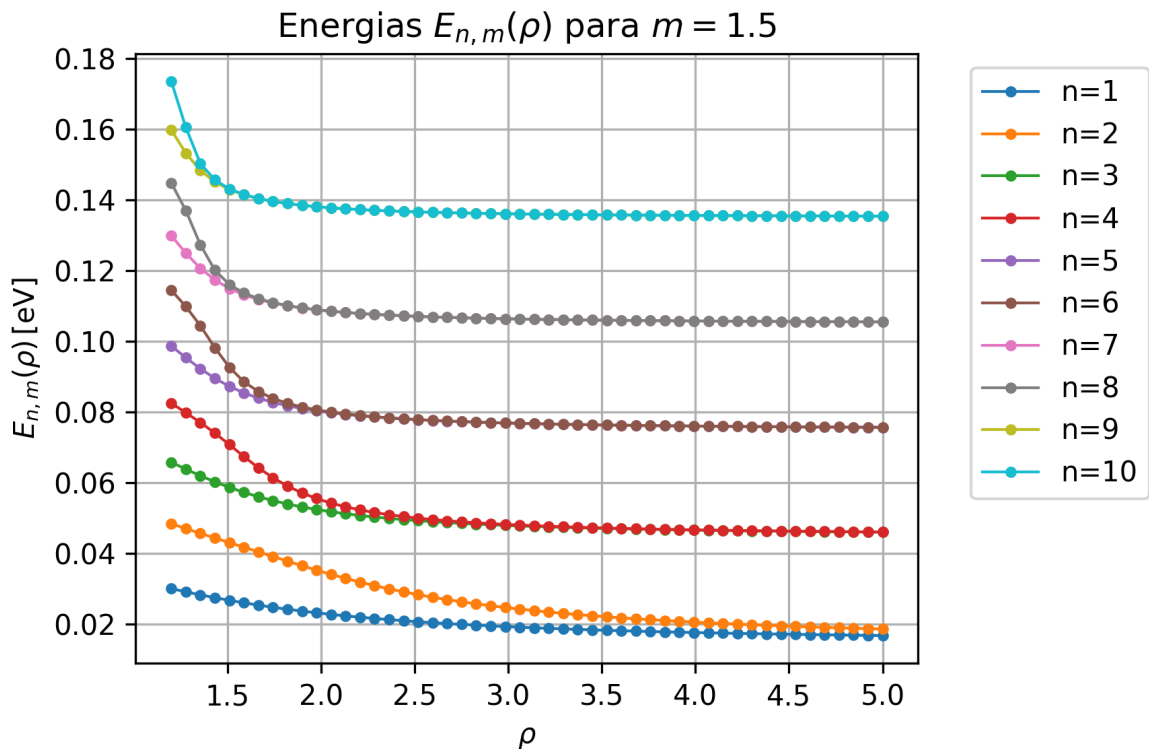


Figura 3.10: Energias $E_{n,1.5}$ em função de ρ , para diversos valores de n . Note que as energias vêm em pares, e o *gap* entre esses pares diminui conforme aumentamos n e ρ .

3.3 Sobre a interação de nanopartículas de isolante topológico toroidal com a luz

Na referência [19], os autores estudaram a resposta de uma nanopartícula esférica de isolante topológico à luz. Estudando as propriedades ópticas, mais especificamente o coeficiente de absorção, eles concluíram que o acoplamento entre os estados de superfície e os fônons do *bulk* do material dá origem a um modo coletivo que denominaram SToP (*Surface Topological Particle*). Esse modo aparece como uma forte ressonância no coeficiente de absorção, seguido por um modo de absorção nula. Em outras palavras, o SToP atua tanto como um intensificador de absorção de luz quanto como uma ferramenta de blindagem.

Com inspiração nisso, vamos atacar o problema do isolante topológico toroidal sujeito à luz (vamos tratar do Bi_2Se_3). Para simplificar, vamos considerar um único estado de superfície

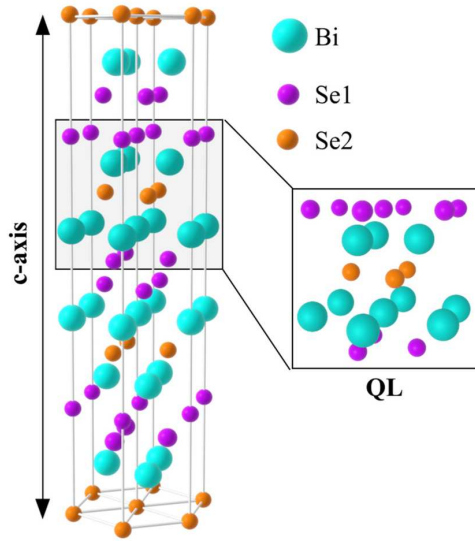


Figura 3.11: Representação da célula unitária do Bi_2Se_3 , mostrando o arranjo em camada quáintupla e a direção do eixo c . Imagem retirada de [34].

sujeito à luz. Vamos considerar uma onda viajando ao longo do eixo z ($\mathbf{k}||z$) que assumiremos que coincide com o eixo c (veja a figura 3.11) do material (o Bi_2Se_3 é construído em camadas, sendo o eixo c a direção em que luz incidente não sofre refração dupla). Esta configuração foi escolhida porque luz se propagando paralelamente ao eixo c cria regras de seleção simples para as transições eletrônicas.

Aqui, trataremos a luz classicamente e os portadores de carga da superfície quânticamente, usando o resultado da seção anterior para os autestados. Para o *bulk* do toro, usaremos a função dielétrica (para mais detalhes sobre modos vibracionais de isolantes topológicos indico a referência [35, 36]):

$$\epsilon_{\text{in}}(\omega) = \sum_{j=\alpha,\beta,f} \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}, \quad (3.21)$$

onde os dois termos de Lorentz são devidos aos fônons transversais α e β e o termo de Drude ($\omega_{0f} = 0$) é devido aos portadores de carga livres (rotulados como f) que surgem dos defeitos do *bulk*. Os parâmetros para os três termos são obtidos de um ajuste aos dados experimentais do Bi_2Se_3 e estão apresentados abaixo [9]:

	ω_{pj}	ω_{0j}	γ_j
α	19.2	2.0	0.15
β	2.3	3.72	0.06
f	11.5	0	0.24

Tabela 3.3: Parâmetros para a função dielétrica volumétrica do Bi_2Se_3 . Os valores dados estão em THz.

Vamos trabalhar com partículas da ordem de nanômetros e vamos assumir que os estados se concentram na superfície do material (o que faz sentido pois a penetração no *bulk* é mínima

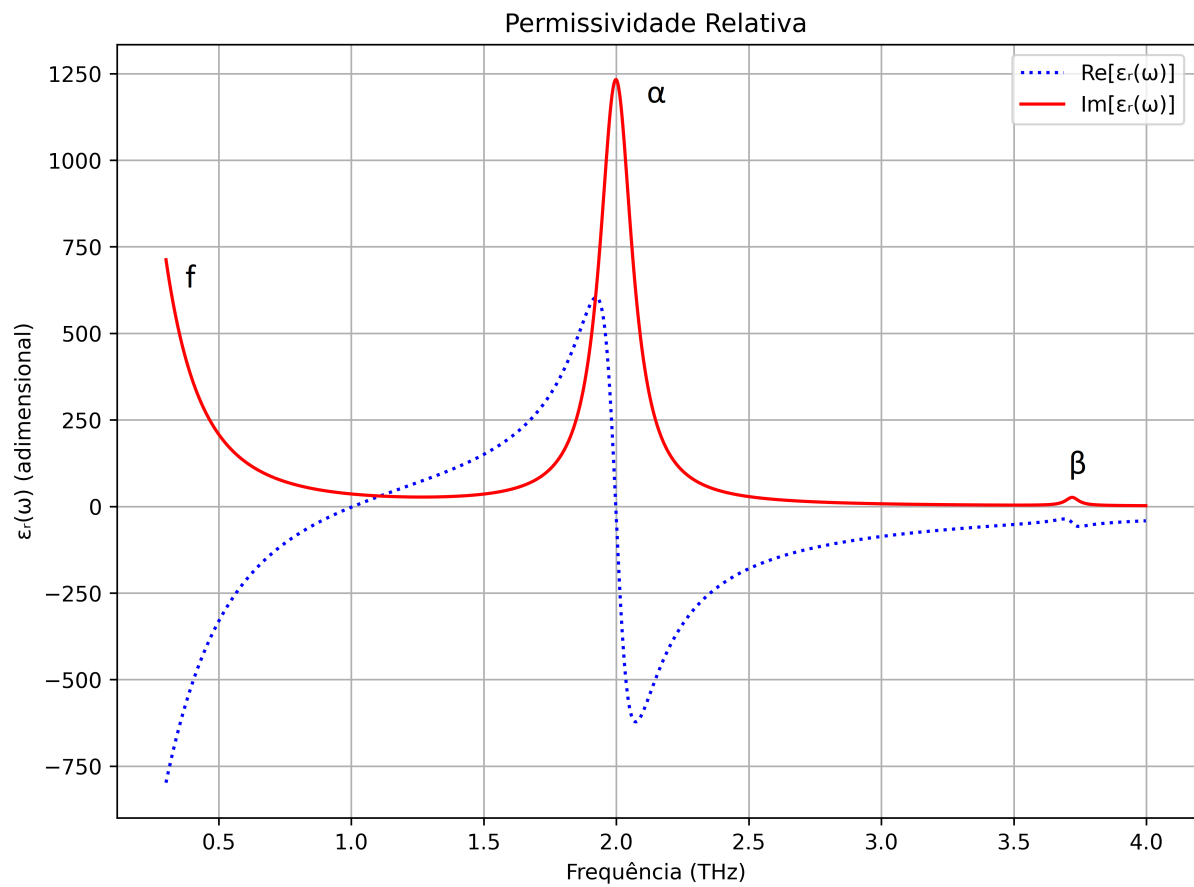


Figura 3.12: Permissividade para o *bulk* de Bi_2Se_3 . Na imagem, vemos as contribuições dos fônons ópticos α e β , e dos portadores de carga livres (denotados por f) provenientes de defeitos no *bulk*. A parte real da permissividade dielétrica está relacionada à polarização e à dispersão anômala, enquanto a parte imaginária está associada à dissipação de energia.

para isolantes topológicos), de modo que estamos num ambiente onde faz sentido aplicar a aproximação dipolar [37, 38]. De fato, se a onda plana incidente tem amplitude $E_0 e^{ikr}$ e se o toro possui dimensões muito pequenas em relação ao comprimento de onda ($R \ll \lambda$), então o campo na região da partícula se escreve:

$$\mathbf{E}(r \leq R) \simeq E_0 e^{i(kR_{in} + \omega t)} \mathbf{e}_r \simeq E_0 e^{i\omega t} \mathbf{e}_r.$$

Em um instante t dado, o campo no interior da nanopartícula pode ser considerado como uniforme. Nesse contexto, podemos ter as seguintes situações num escopo de teoria de perturbação: se a frequência da luz incidente é ressonante com a diferença de energia entre níveis, temos a regra de ouro de Fermi para as transições energéticas; caso as frequências não estejam na condição de ressonância, então a perturbação induz uma densidade de probabilidade dependente do tempo e, portanto, uma densidade de carga.

O acoplamento resultante entre os estados de superfície e o campo externo induz uma densidade de carga superficial. Nesse regime de grandes comprimentos de onda, podemos escrever a densidade de carga induzida como uma resposta ao próprio potencial da luz incidente:

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega) \phi_{\text{inc}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.22)$$

onde $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ é a função resposta (uma susceptibilidade efetiva, digamos) e $\phi_{\text{inc}}(\mathbf{q}, \omega)$ é o potencial incidente/estímulo. Calculamos uma susceptibilidade efetiva usando a expressão tipo-Kubo [39]:

$$\chi(\omega) = \frac{e^2}{A_{\text{toro}}} \sum_{n,m} \frac{\left| \int_{\mathbb{R}^2} d^2r \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_m(\mathbf{r}) \right|^2}{\hbar\omega + E_n - E_m}, \quad (3.23)$$

onde usamos as funções de onda calculadas na seção anterior para computar os termos. Aqui, assumimos que o nível de Fermi E_F está no estado fundamental. As transições permitidas são tais que $\Delta s = 0$, $\Delta m \pm 1$ e consideramos apenas transições que sejam da ordem de E_F .

Podemos estudar as propriedades ópticas deste nosso isolante topológico toroidal analisando como sua resposta modifica o campo externo incidente, e podemos fazer isso resolvendo as equações de Maxwell com as condições de contorno adequadas. Infelizmente, o sistema de coordenadas que estamos utilizando até agora não é adequado para realizar esse passo pois a equação de Laplace não é separável nesse sistema. Para tanto, a utilização de coordenadas toroidais se faz conveniente [40]:

$$\begin{cases} x = \frac{a \sinh \tau}{\cosh \tau - \cos \theta} \cos \phi \\ y = \frac{a \sinh \tau}{\cosh \tau - \cos \theta} \sin \phi \\ z = \frac{a \sin \theta}{\cosh \tau - \cos \theta} \end{cases} \quad (3.24)$$

A superfície do toro é descrita por uma constante τ_0 . A região interna (externa) do toroide é caracterizada por $\tau > \tau_0$ ($\tau < \tau_0$). Temos as identificações

$$\cosh \tau_0 = \frac{R}{r}, \quad a = \sqrt{R^2 - r^2}.$$

A equação de Laplace é separável nesse sistema e podemos resolvê-la para o potencial elétrico. A solução geral de $\nabla^2 \Phi = 0$ pode ser escrita como

$$\Phi = \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{j,k=0}^{\infty} \left[A_{jk} P_{j-\frac{1}{2}}^k(\cosh \tau) + B_{jk} Q_{j-\frac{1}{2}}^k(\cosh \tau) \right] e^{ij\theta} e^{ij\phi}$$

onde P_V^m, Q_V^m são funções de Legendre de índice meio-inteiro, chamadas de harmônicos toroidais e $f(\tau, \theta) = \sqrt{\cosh \tau - \cos \theta}$. As funções Q_V^m são irregulares em $\tau = 0$, que corresponde ao eixo z ou pontos distantes da superfície do toro. Por outro lado, as funções P_V^m são irregulares no interior do toro.

Assumindo que o campo elétrico incidente é $\mathbf{E} = E_0 \hat{x}$, então o potencial aplicado é $\phi_{inc} = -E_0 x$. Em coordenadas toroidais, podemos expandir x em termos dos harmônicos toroidais [40] para obter:

$$\Phi_{inc} = \frac{2\sqrt{2}aE_0}{\pi} \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{n=0}^{+\infty} (2 - \delta_{n,0}) Q_{n-\frac{1}{2}}^{m=1}(\cosh \tau) \cos(n\theta) \cos \phi.$$

As simetrias impostas por este campo aplicado fazem com que os potenciais interno e externo do toro dependam apenas de $\cos \phi$ e de $\cos(n\theta)$. Assim:

$$\Phi_{in}(\mathbf{r}) = \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{n=0}^{+\infty} D_n Q_{n-1/2}^{m=1}(\cosh \tau) \cos(n\theta) \cos \phi \quad (3.25)$$

$$\Phi_{out}(\mathbf{r}) = \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{n=0}^{+\infty} [A_n P_{n-\frac{1}{2}}^{m=1}(\cosh \tau) + B_n Q_{n-\frac{1}{2}}^{m=1}(\cosh \tau)] \cos(n\theta) \cos \phi \quad (3.26)$$

Mais detalhes sobre a estrutura e o cálculo desses potenciais se encontram no Apêndice B. Podemos escrever o potencial no exterior como

$$\Phi_{out} = \Phi_{inc} + \Phi_{toro}, \quad (3.27)$$

onde

$$\Phi_{toro} = \sqrt{f(\tau, \theta)} \left[A_0 P_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau) + A_1 P_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau) \cos \theta \right] \cos \phi, \quad (3.28)$$

com os coeficientes dados pelas equações B.4 e B.5.

Para pontos distantes do toro, podemos usar o comportamento assintótico dos harmônicos toroidais [41] para encontrar a resposta dipolar e usá-la para discutir as propriedades ópticas [42]. Nesse limite, a resposta do sistema toma a forma de um momento de dipolo:

$$\mathbf{p} = \varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \alpha \mathbf{E}, \quad (3.29)$$

com $\alpha = a(A_1 - A_0)/(4)$ sendo a polarizabilidade, de modo que temos, por exemplo, o coeficiente de absorção dado por $\sigma_{\text{abs}} = \text{Im} \left(\frac{2\pi a(A_1 - A_0)}{4\lambda \varepsilon_0} \right)$. Para comparar com o caso esférico que citamos no início do capítulo, resolvemos as expressões do Apêndice B numericamente e plotamos algumas curvas de σ_{abs} em função de ω .

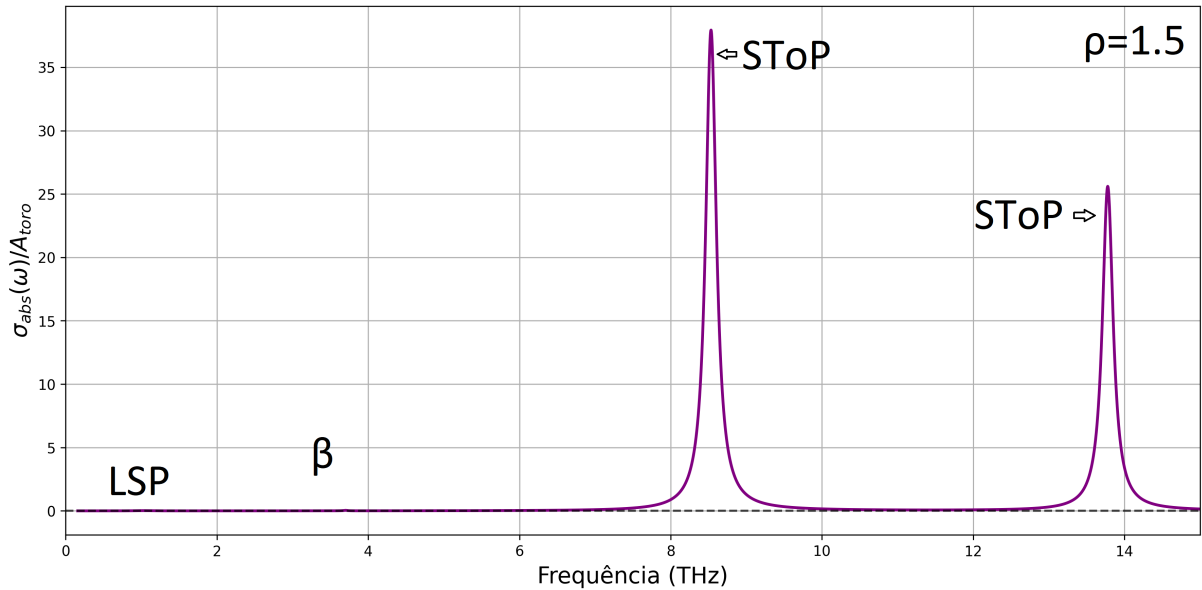


Figura 3.13: σ_{abs} normalizado pela área do toro em função da frequência incidente, para $\rho = 1.5$. A ressonância dos SToP nesse regime é muito maior que a dos fônons e não conseguimos visualizar os picos advindos da permissividade do *bulk*. Vemos dois picos bastante pronunciados de natureza topológica.

Vemos o surgimento de dois modos topológicos, diferentemente da esfera onde aparecia apenas um. Podemos atribuir isso ao fato do toro ser constituído efetivamente de duas regiões distintas, uma com curvatura negativa e outra com curvatura positiva. Na figura acima, para um toro relativamente “grosso”, a amplitude da ressonância dos dois modos é grande o suficiente para suprimir a visualização dos picos devido aos fônons. Em geral, sempre teremos os dois picos menores e eles não variam com ρ : um relacionado aos fônons β , e outro devido aos portadores de carga do *bulk* (chamados de plásmos de superfície localizados, ou LSP). Não vemos picos devido aos fônons α pois ele está em regime superamortecido [19].

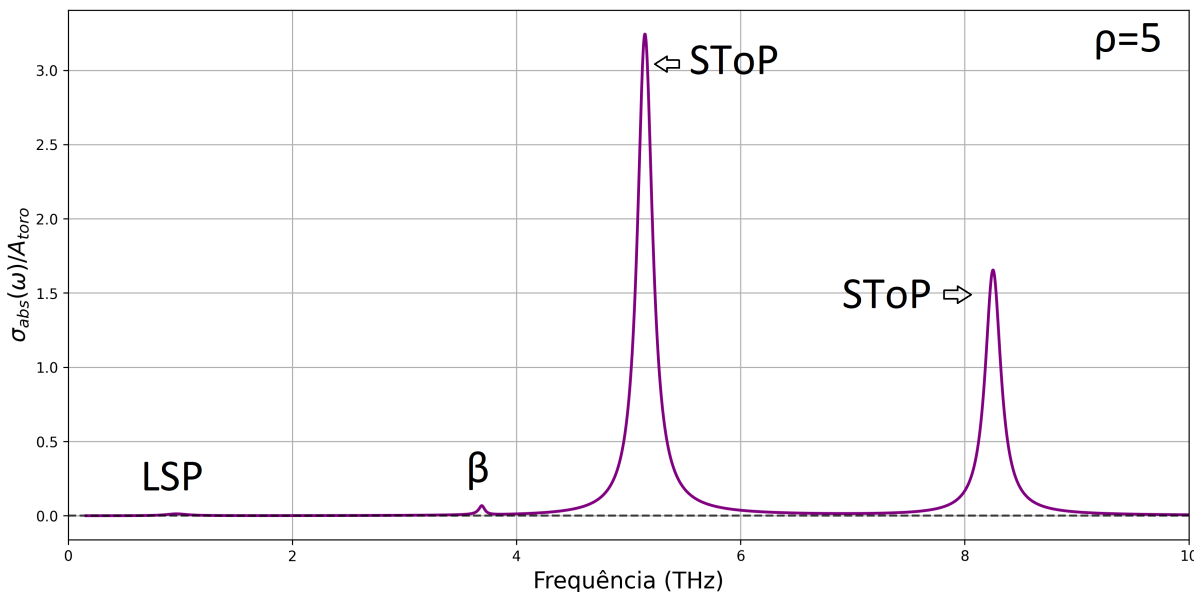


Figura 3.14: σ_{abs} normalizado pela área do toro em função da frequência incidente, para $\rho = 5$. Agora, apesar de muito pequenos, conseguimos visualizar os picos devido ao *bulk*. Conforme aproximamos o toro de um anel, os modos SToP começam a interagir mais fortemente, se aproximando energeticamente e diminuindo suas amplitudes.

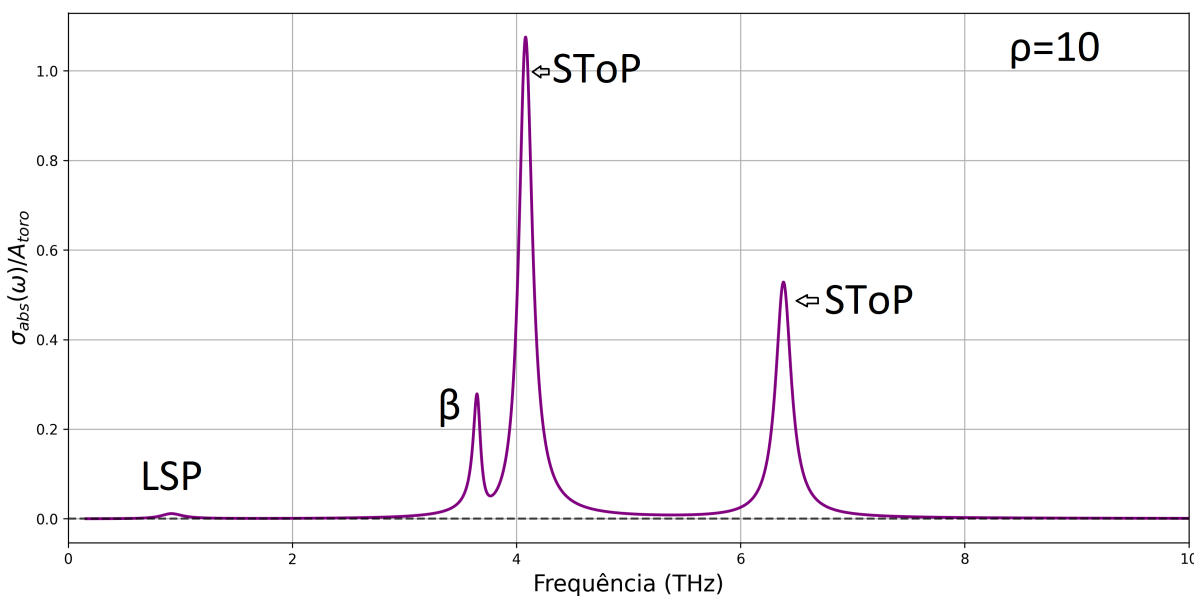


Figura 3.15: σ_{abs} normalizado pela área do toro em função da frequência incidente, para $\rho = 10$. Agora, as ressonâncias dos SToP começam a ficar da ordem dos picos devido ao *bulk*.

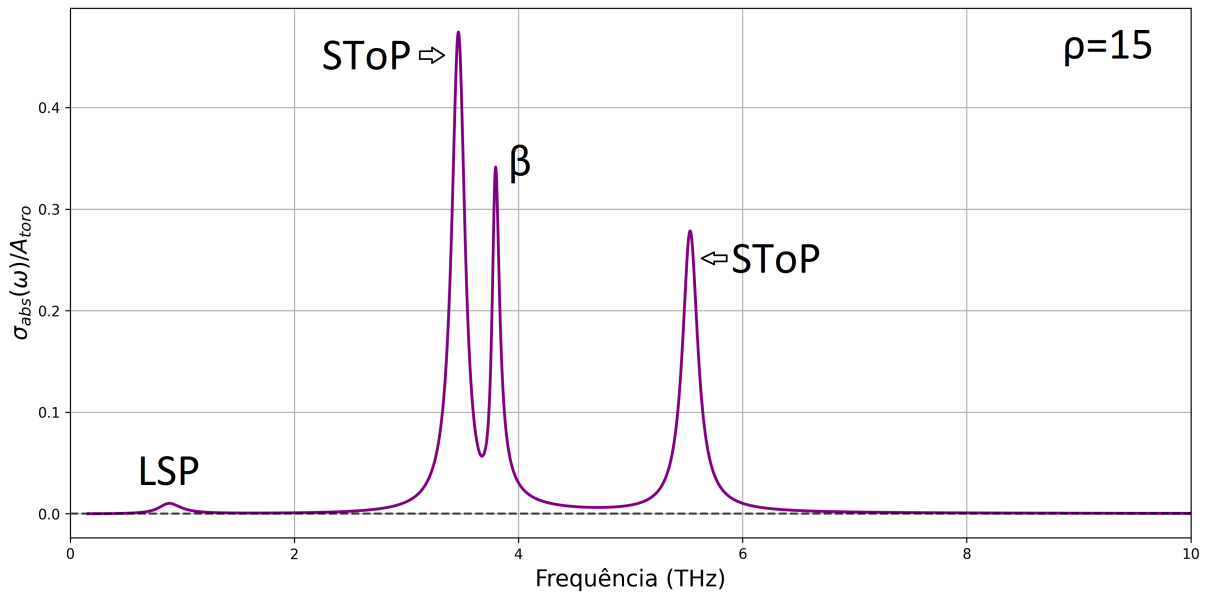


Figura 3.16: σ_{abs} normalizado pela área do toro em função da frequência incidente, para $\rho = 15$. Aqui, há uma sobreposição dos modos SToP e dos fônons β . A amplitude da ressonância dos SToP é bem próxima dos fônons do *bulk*, e os dois modos se aproximam energeticamente.

Notamos pelo comportamento das curvas que os plásmons de origem topológica tendem a se aproximar conforme afinamos o toro, numa espécie de hibridização (que também ocorre no análogo metálico [43]). Além disso, as ressonâncias perdem amplitude devido à interação entre eles. Uma diferença importante em relação à esfera é a ausência de um modo de absorção nula nas zonas vizinhas do SToP. No toro, portanto, os modos não são capazes de blindar o *bulk*, provavelmente devido à esse efeito de hibridização.

Um artigo está sendo preparado com os resultados desse capítulo, bem como uma análise mais cuidadosa dos estados no limite da equação de Mathieu, e será submetido em breve.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Primeiramente, estudamos um isolante topológico cônico e encontramos o operador de Dirac que age efetivamente sobre as partículas na superfície do material. De fato, elas são descritas por uma equação do tipo-Dirac para férmions de massa nula, e essa equação acopla-se à geometria não trivial da superfície por meio de termos de conexão de spin e termos de correção de velocidade que dependem do ângulo de abertura do cone. As equações foram resolvidas e os estados de superfície foram obtidos analiticamente. O comportamento geral consiste em funções que tendem a se localizar na ponta do cone para estados de baixa energia. Para estados excitados, as componentes do espinor oscilam de tal modo que a distribuição espacial dos portadores de carga consiste em um padrão de franjas de interferência.

A caracterização que obtivemos pode ser útil para possíveis aplicações. Por exemplo, sabe-se que sistemas de constrição podem ser úteis para filtragem de estados [44, 45]. Do ponto de vista da equação de Schrödinger, se acoplarmos dois cones pela ponta, essa constrição atuará como um filtro de partículas, selecionando partículas com certo momento angular. Se isso também valer para a equação de Dirac, pode-se imaginar um dispositivo composto por dois isolantes topológicos cônicos conectados pela ponta atuando como filtro de spin. Além disso, como a densidade local de estados é sensível à geometria, e podemos manipular as energias controlando o ângulo de abertura do cone, poderíamos acoplar cones completamente diferentes para obter um conjunto diversificado de estados ao redor da ponta. Por fim, mostramos que a curvatura não trivial induziu um componente de spin fora do plano, quebrando o *spin-to-surface locking*.

Depois, estudamos o isolante topológico toroidal, caracterizando os estados de superfície e seu espectro, bem como a resposta desse material à luz. A dinâmica dos portadores de carga é rica devido ao potencial efetivo induzido pela curvatura variável, que cria poços e cristas que localizam as partículas em determinadas regiões da superfície do toro. Um comportamento anômalo (que está de acordo com as soluções da equação de Pauli no toro) nas energias foi observado: a partir de determinado limiar, os estados se tornam degenerados em pares.

Vimos que ao incidirmos luz numa nanopartícula toroidal, dois modos plasmônicos surgem como resposta, diferente da esfera onde é observado apenas um modo. Novamente, a geometria

do toro é central: o toro é dividido em duas regiões de sinais de curvaturas opostos, e um plásmon é excitado para cada região. Esses modos criam fortes ressonâncias que amplificam em uma ordem de grandeza a absorção de luz no material. Nesse contexto, imaginamos que essas propriedades podem ser úteis para aplicações em nanofotônica em geral.

Como perspectiva, pensamos em estender o trabalho do nanocone topológico e estudar também como ele se comporta sob influência da luz. A tendência de acúmulo de estados na ponta do cone pode levar a uma forte localização de plásmons [46], que poderia ser interessante para aplicações em microscopia (onde temos uma região muito pontiaguda na ponta), por exemplo.

Bibliografia

- [1] Gordon Fraser. *The New Physics: For the Twenty-First Century*, volume 10. Cambridge University Press, 2006.
- [2] Klaus v. Klitzing, Gerhard Dorda, and Michael Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical review letters*, 45(6):494, 1980.
- [3] Wolfgang Kühnel. *Differential geometry*, volume 77. American Mathematical Soc., 2015.
- [4] B Andrei Bernevig. Topological insulators and topological superconductors. In *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton university press, 2013.
- [5] Charles Kittel and Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 2018.
- [6] R Shankar. Topological insulators—a review. *arXiv preprint arXiv:1804.06471*, 2018.
- [7] Charles Kane and Joel Moore. Topological insulators. *Physics World*, 24(02):32, 2011.
- [8] M Zahid Hasan and Charles L Kane. Colloquium: topological insulators. *Reviews of modern physics*, 82(4):3045–3067, 2010.
- [9] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Reviews of modern physics*, 83(4):1057–1110, 2011.
- [10] SM Rezende. *Fundamentals of magnonics* cham, switz: Springer nature switz, 2020.
- [11] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin hall effect and topological insulators. *Physics Today*, 63(1):33–38, 2010.
- [12] Charles L Kane. Topological band theory and the \mathbb{Z}_2 invariant. In *Contemporary Concepts of Condensed Matter Science*, volume 6, pages 3–34. Elsevier, 2013.
- [13] Wen-Yu Shan, Hai-Zhou Lu, and Shun-Qing Shen. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators. *New Journal of Physics*, 12(4):043048, 2010.

- [14] Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, HaiJun Zhang, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Model hamiltonian for topological insulators. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 82(4):045122, 2010.
- [15] Daniel E Gomez, Marco Califano, and Paul Mulvaney. Optical properties of single semiconductor nanocrystals. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 8(43):4989–5011, 2006.
- [16] Jacob Linder, Takehito Yokoyama, and Asle Sudbø. Anomalous finite size effects on surface states in the topological insulator Bi_2Se_3 . *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 80(20):205401, 2009.
- [17] Gleb Siroki, Peter D Haynes, Derek KK Lee, and Vincenzo Giannini. Protection of surface states in topological nanoparticles. *Physical Review Materials*, 1(2):024201, 2017.
- [18] Ken-Ichiro Imura, Yukinori Yoshimura, Yositake Takane, and Takahiro Fukui. Spherical topological insulator. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 86(23):235119, 2012.
- [19] G Siroki, DKK Lee, PD Haynes, and V Giannini. Single-electron induced surface plasmons on a topological nanoparticle. *Nature communications*, 7(1):12375, 2016.
- [20] Jakson M Fonseca, Winder A Moura-Melo, and Afranio R Pereira. Geometrically induced electric polarization in conical topological insulators. *Journal of Applied Physics*, 111(6), 2012.
- [21] Jakson M Fonseca, Vagson L Carvalho-Santos, Winder A Moura-Melo, and Afranio R Pereira. Berry phases and zero-modes in toroidal topological insulator. *The European Physical Journal B*, 89:1–6, 2016.
- [22] LG Veiga and WA Moura-Melo. Surface states and breaking down of spin-to-surface locking on a conical topological insulator quantum dot. *The European Physical Journal B*, 95(11):178, 2022.
- [23] Yositake Takane and Ken-Ichiro Imura. Unified description of dirac electrons on a curved surface of topological insulators. *Journal of the Physical Society of Japan*, 82(7):074712, 2013.
- [24] FT Brandt and JA Sánchez-Monroy. Dirac equation on a curved surface. *Physics Letters A*, 380(38):3036–3043, 2016.
- [25] Valdir Barbosa Bezerra. On some classical and quantum effects due to gravitational fields. *Brazilian journal of physics*, 36:141–156, 2006.
- [26] Zhuo Bin Siu, Seng Ghee Tan, and Mansoor BA Jalil. Effective hamiltonian for surface states of topological insulator nanotubes. *Scientific reports*, 7(1):45350, 2017.

- [27] Zhuo Bin Siu, Mansoor Jalil, and Seng Ghee Tan. Curvature induced out of plane spin accumulation. *arXiv preprint arXiv:1602.05747*, 2016.
- [28] Arijit Kundu, Alex Zazunov, Alfredo Levy Yeyati, Thierry Martin, and Reinhold Egger. Energy spectrum and broken spin-surface locking in topological insulator quantum dots. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 83(12):125429, 2011.
- [29] Julio C Gutiérrez-Vega, RM Rodríguez-Dagnino, MA Meneses-Nava, and S Chávez-Cerda. Mathieu functions, a visual approach. *American Journal of Physics*, 71(3):233–242, 2003.
- [30] R. Aldrovandi and P.L. Ferreira. *The quantum pendulum*. Instituto de Física Teórica, USP, 1979.
- [31] Francisco J Blanco-Silva. *Mastering SciPy*. Packt Publishing Ltd, 2015.
- [32] Barry Simon. Sturm oscillation and comparison theorems. In *Sturm-Liouville Theory: Past and Present*, pages 29–43. Springer, 2005.
- [33] Alexandre GM Schmidt. Solution for pauli equation in a toroidal surface with uniform magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 110:88–94, 2019.
- [34] Rubén Gracia-Abad, Soraya Sangiao, Chiara Bigi, Sandeep Kumar Chaluvadi, Pasquale Orgiani, and José María De Teresa. Omnipresence of weak antilocalization (wal) in Bi_2Se_3 thin films: a review on its origin. *Nanomaterials*, 11(5):1077, 2021.
- [35] V Wagner, G Dolling, BM Powell, and G Landwehr. Lattice vibrations of Bi_2Te_3 . *physica status solidi (b)*, 85(1):311–317, 1978.
- [36] Wei Cheng and Shang-Fen Ren. Phonons of single quintuple Bi_2Te_3 and Bi_2Se_3 films and bulk materials. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 83(9):094301, 2011.
- [37] Dror Sarid and William A Challener. *Modern introduction to surface plasmons: theory, Mathematica modeling, and applications*. Cambridge university press, 2010.
- [38] Xianguang Yang and Baojun Li. Localized and propagated surface plasmons in metal nanoparticles and nanowires. *Intech Open*, pages 21–38, 2018.
- [39] Ming-Che Chang. Chap 3 linear response theory, 2013.
- [40] Philip McCord Morse and Herman Feshbach. *Methods of theoretical physics*. Technology Press, 1946.

-
- [41] JA Hernandez and Andre Koch Torres Assis. Electric potential for a resistive toroidal conductor carrying a steady azimuthal current. *Physical Review E*, 68(4):046611, 2003.
- [42] Alexandre Mary, DM Koller, A Hohenau, JR Krenn, Alexandre Bouhelier, and Alain Dereux. Optical absorption of torus-shaped metal nanoparticles in the visible range. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 76(24):245422, 2007.
- [43] Peter Nordlander, C Oubre, E Prodan, K Li, and MI Stockman. Plasmon hybridization in nanoparticle dimers. *Nano letters*, 4(5):899–903, 2004.
- [44] Felipe Azevedo Gomes, Valdir Barbosa Bezerra, Jonas Romero Fonseca de Lima, and Fernando Jorge Sampaio Moraes. Electronic properties of single and double napped carbon nanocones. *The European Physical Journal B*, 92:1–11, 2019.
- [45] Krzysztof Kowalski and Jakub Rembieliński. On the dynamics of a particle on a cone. *Annals of Physics*, 329:146–157, 2013.
- [46] AJ Babadjanyan, NL Margaryan, and Kh V Nerkararyan. Superfocusing of surface polaritons in the conical structure. *Journal of Applied Physics*, 87(8):3785–3788, 2000.
- [47] Amparo Gil, Javier Segura, and Nico M Temme. Computing toroidal functions for wide ranges of the parameters. *Journal of Computational Physics*, 161(1):204–217, 2000.

Apêndice A

Operador de Dirac para estados de borda no isolante topológico cônico

Seguindo o método geral desenvolvido na referência [23], começamos pela Hamiltoniana descrita na Eq. 1.6. Por simplicidade, escolhemos $\varepsilon(\mathbf{k})$ como nulo para que o espectro seja simétrico em relação a $E = 0$. Retirar este termo deixa inalterada a distinção entre fases topologicamente triviais ($\frac{m_0}{m_2} > 0$) e não triviais ($\frac{m_0}{m_2} < 0$). A condição isotrópica junto com o desaparecimento de $\varepsilon(\mathbf{k})$ leva a um modelo com apenas três parâmetros (A, m_0, m_2).

Agora, projetamos o hamiltoniano de *bulk* na superfície e para fazer isso o reescrevemos em termos das coordenadas curvilíneas, e então o dividimos em dois componentes, um sendo perpendicular e o outro tangente à superfície. A primeira parte descreve a penetração das funções de onda de superfície no *bulk*, e a segunda parte determina as propriedades energéticas da superfície. Temos $H = H_{\perp} + H_{\parallel}$, com

$$\begin{aligned} H_{\perp} &= \begin{bmatrix} m_0 - m_2 \nabla_{\perp}^2 & -iA \sigma^3 \partial_3 \\ -iA \sigma^3 \partial_3 & -m_0 + m_2 \nabla_{\perp}^2 \end{bmatrix}, \\ H_{\parallel} &= \begin{bmatrix} -m_2 \nabla_{\parallel}^2 & -iA \sum_{i=1}^2 \sigma^i \partial_i \\ -iA \sum_{i=1}^2 \sigma^i \partial_i & m_2 \nabla_{\parallel}^2 \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{A.1}$$

onde os operadores laplacianos acoplados à geometria cônica são lidos como

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \partial_{\theta} (\sin \theta \partial_{\theta}), \quad \nabla_{\parallel}^2 = \frac{1}{r \sin \theta} \sum_{i,j=1}^2 \partial_i (r \sin \theta g^{ij} \partial_j),$$

com $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$ [23]. Além disso, as matrizes de spin acopladas às coordenadas são $\sigma^i \equiv e^i \cdot \sigma$, e

para a geometria cônica elas são lidas como:

$$\begin{aligned}\sigma^1 &= \begin{bmatrix} \beta & \alpha e^{-i\phi} \\ \alpha e^{i\phi} & -\beta \end{bmatrix} \\ \sigma^2 &= \frac{1}{\alpha r} \begin{bmatrix} 0 & -ie^{-i\phi} \\ ie^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma^3 &= \begin{bmatrix} \alpha & -\beta e^{-i\phi} \\ -\beta e^{i\phi} & -\alpha \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.2})$$

No problema de autovalores normal, temos

$$H_{\perp}|\Psi\rangle = E_{\perp}|\Psi\rangle, \quad (\text{A.3})$$

para o qual podemos assumir que os estados são exponencialmente localizados próximos aos estados de superfície:

$$|\Psi\rangle = e^{k_-(\theta-\theta_0)} |u_-(r, \phi)\rangle - e^{k_+(\theta-\theta_0)} |u_+(r, \phi)\rangle. \quad (\text{A.4})$$

A condição de contorno $|\Psi(\theta = \theta_0)\rangle = 0$ estabelece que todas as quatro componentes da função de onda se anulam na superfície do cone (em $\theta = \theta_0$) e então não há portadores de carga fora da superfície do TI. Isso leva a uma condição de energia zero e encontramos os autoestados base de H_{\perp} :

$$|\pm\rangle = \rho(\theta) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} |\theta_+\rangle \\ \mp i|\theta_-\rangle \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

com $\rho(\theta)$ sendo uma combinação linear das exponenciais e os vetores $|\theta_+\rangle, |\theta_-\rangle$ são autovetores de σ^3 , satisfazendo

$$\sigma^3|\theta_{\pm}\rangle = \pm|\theta_{\pm}\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Se exigirmos que $|\theta_{\pm}\rangle$ estejam conectados por reversão temporal como $|\theta_+\rangle = -i\sigma_y|\theta_-\rangle^*$, então temos para a geometria cônica

$$|\theta_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2+2\alpha}} \begin{bmatrix} -(\alpha+1)e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \beta e^{i\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

$$|\theta_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2+2\alpha}} \begin{bmatrix} \beta e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ (\alpha+1)e^{i\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Qualquer estado de superfície $|\Psi\rangle$ pode ser representado como uma combinação linear de $|+\rangle$ e $|-\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle. \quad (\text{A.9})$$

O Hamiltoniano superficial efetivo para o spinor $a = \begin{bmatrix} a_+ \\ a_- \end{bmatrix}$, é dado por

$$H_{sup} = \begin{bmatrix} \langle +|H_{\parallel}|+ \rangle & \langle +|H_{\parallel}|- \rangle \\ \langle -|H_{\parallel}|+ \rangle & \langle -|H_{\parallel}|- \rangle \end{bmatrix} . \quad (\text{A.10})$$

A abordagem aqui é paralela à da teoria de perturbação degenerada, como discutido em [13]. Aqui, $H_0 = H_{\perp}$ é um Hamiltoniano não perturbado e $|\pm\rangle$ são seus autoestados degenerados. Para encontrar o espectro do Hamiltoniano perturbado $H_{tot} = H_0 + H'$, no qual $H' = H_{\parallel}$ e $H_{tot} = H_{bulk}$, temos que calcular primeiro os elementos de matriz $\langle \alpha|H'|\beta \rangle$, ($\alpha, \beta = \pm$), e então diagonalizá-lo. A avaliação dos elementos de matriz leva a

$$H_{sup} = \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{D}_+ \\ \mathcal{D}_- & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_+ = \sum_{i=1}^2 (\eta_i A - \xi_i m_2) \left(\partial_i + \frac{1}{2} [\partial_i \ln(\sqrt{G})] \right) \\ + \frac{1}{2} \partial_i (\eta_i A - \xi_i m_2), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_- = \sum_{i=1}^2 -(\eta_i A - \xi_i m_2)^* \left(\partial_i + \frac{1}{2} [\partial_i \ln(\sqrt{G})] \right) \\ - \frac{1}{2} \partial_i (\eta_i A - \xi_i m_2)^*. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Nas expressões acima,

$$\begin{aligned} \eta_i &= \frac{\langle \sqrt{G} \theta_+^\dagger \sigma^i \theta_- \rangle}{\langle \sqrt{G} \rangle}, \\ \xi_i &= \sum_{j=1}^2 \frac{\langle \sqrt{G} b_j^i \theta_+^\dagger \sigma^i \theta_- \rangle}{\langle \sqrt{G} \rangle}. \end{aligned}$$

Todas as médias aqui são tomadas com respeito à coordenada normal, θ . Temos $b_j^i = \partial_j(\mathbf{e}_3) \cdot \mathbf{e}^i$. Assim, podemos calcular todos os termos necessários:

$$\begin{aligned} b_1^1 = b_2^1 = b_1^2 = 0, \text{ enquanto } b_2^2 = \frac{\beta}{\alpha r}, \\ \theta_+^\dagger \sigma^1 \theta_- = -1, \\ \theta_+^\dagger \sigma^2 \theta_- = \frac{i}{\alpha r}. \end{aligned}$$

Como todas as médias são sobre a componente normal, e é razoável assumir que a coordenada θ será praticamente constante na superfície, podemos descartar as médias e obtemos:

$$\begin{aligned}\eta_1 &= -1 \quad , \\ \eta_2 &= \frac{i}{\alpha r} \quad , \\ \xi_1 &= 0 \quad , \\ \xi_2 &= \frac{\beta i}{\alpha^2 r^2} \quad .\end{aligned}$$

Substituindo essas quantidades no operador de Dirac efetivo, chegamos ao operador de Dirac cônico para um isolante topológico:

$$\mathcal{D}_{\pm} = \mp A \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r} \right) + \left(\frac{iA}{\alpha r} + \frac{i\beta}{\alpha^2 r^2} m_2 \right) \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (\text{A.14})$$

Como vemos na tabela 1.1, o parâmetro A é da ordem de $\text{eV} \cdot \text{\AA}$, enquanto o parâmetro m_2 é da ordem de $\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$. Logo, numa primeira aproximação, podemos ignorar o termo de correção de velocidade $\frac{i\beta}{\alpha^2 r^2} m_2$.

Apêndice B

Potencial elétrico do isolante topológico toroidal sob a influência de uma onda eletromagnética

Partimos das equações para dentro e fora do toro:

$$\Phi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{n=0}^{+\infty} D_n Q_{n-1/2}^{m=1}(\cosh \tau) \cos(n\theta) \cos \phi \quad (\text{B.1})$$

$$\Phi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \sqrt{f(\tau, \theta)} \sum_{n=0}^{+\infty} [A_n P_{n-1/2}^{m=1}(\cosh \tau) + B_n Q_{n-1/2}^{m=1}(\cosh \tau)] \cos(n\theta) \cos \phi \quad (\text{B.2})$$

A condição no infinito, $\Phi \rightarrow \Phi_{\text{inc}}$ quando $\tau \rightarrow 0$, determina

$$B_n = B = E_0 \frac{2\sqrt{2}a}{\pi}. \quad (\text{B.3})$$

As condições de contorno são, assumindo que o meio externo é vácuo:

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{in}}(\tau_0, \theta, \phi) &= \Phi_{\text{out}}(\tau_0, \theta, \phi) \\ \varepsilon(\omega) \frac{\partial \Phi_{\text{in}}}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0} &= \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi_{\text{out}}}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0} + \sigma. \end{aligned}$$

com $\sigma = \chi(\theta, \omega) \phi_{\text{inc}}$. No contexto de aproximação dipolar, podemos nos restringir a apenas os dois primeiros termos da soma, de modo que a resolução das condições de contorno nos leva às seguintes expressões para os coeficientes do potencial externo:

$$A_0 = aE_0 \frac{(\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0)W_0 - \frac{2\sqrt{2}}{\pi}((Z_0^1 - 2K_1^1)\alpha\chi P_{1/2}^1(\cosh \tau_0) - \alpha\chi Q_{-1/2}^1(\cosh \tau_0)C_1^1 + a^2\chi^2 Q_{-1/2}^1(\cosh \tau_0)P_{1/2}^1(\cosh \tau_0) + G_1^1\alpha\chi Q_{1/2}^1(\cosh \tau_0))}{(C_0^1 - \alpha\chi P_{-1/2}^1(\cosh \tau_0))(C_1^1 - \alpha\chi P_{1/2}^1(\cosh \tau_0)) - 2G_0^1G_1^1}, \quad (\text{B.4})$$

e também

$$A_1 = aE_0 \frac{(\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0)W_1 - \frac{2\sqrt{2}}{\pi}(2(Z_1^1 - K_0^1)a\chi P_{-1/2}^1(\cosh \tau_0) - a\chi Q_{1/2}^1(\cosh \tau_0)C_0^1 + a^2\chi^2 Q_{1/2}^1(\cosh \tau_0)P_{-1/2}^1(\cosh \tau_0) + G_0^1 a\chi Q_{-1/2}^1(\cosh \tau_0))}{(C_0^1 - a\chi P_{-1/2}^1(\cosh \tau_0))(C_1^1 - a\chi P_{1/2}^1(\cosh \tau_0)) - 2G_0^1 G_1^1} \quad (\text{B.5})$$

com

$$K_0^1 = [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)',$$

$$K_1^1 = [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)',$$

em que $Q_{n-1/2}^1(\cosh \tau_0)'$ indica a derivada

$$\frac{d}{dq_1} Q_{n-1/2}^1(q_1)$$

avaliada em $q_1 = \cosh \tau_0$. Além disso,

$$Z_0^1 = 2 \cosh \tau_0 [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)' - [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] \sinh \tau_0 Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)',$$

$$Z_1^1 = 2 \cosh \tau_0 [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)' - [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0] \sinh \tau_0 Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)'.$$

Também,

$$G_0^1 = \varepsilon_0 Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) P_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)' - \varepsilon(\omega) P_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)',$$

$$G_1^1 = \varepsilon_0 Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) P_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)' - \varepsilon(\omega) P_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0)'.$$

Por fim,

$$C_0^1 = [(\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0) \sinh \tau_0 P_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) Q_{-\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) - 2G_0^1 \cosh \tau_0],$$

$$C_1^1 = [(\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0) \sinh \tau_0 P_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) Q_{\frac{1}{2}}^1(\cosh \tau_0) - 2G_1^1 \cosh \tau_0].$$

Se fizermos $\chi \rightarrow 0$, obtemos o resultado para a nanopartícula toroidal metálica, sem a resposta dos estados de superfície [42]. Para computar os harmônicos toroidais numericamente, utilizamos o algoritmo desenvolvido por Gil e Segura [47].