

JAKSON MIRANDA FONSECA

ALGUMAS CONTRIBUIÇÕES AO ESTUDO DO GRAFENO E DOS
ISOLANTES TOPOLÓGICOS

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

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2012

JAKSON MIRANDA FONSECA

**ALGUMAS CONTRIBUIÇÕES AO ESTUDO DO GRAFENO E DOS 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: 13 de fevereiro de 2012.

Lucas Álvares da Silva Mol
(Coorientador)

Afrânio Rodrigues Pereira
(Coorientador)

Claudio Benedito Silva Furtado

Edmar Avellar Soares

Winder Alexander de Moura Melo
(Orientador)

*A todos aqueles que tornaram possível a realização deste trabalho;
aos que me incentivaram por achar que eu fosse capaz;
e àqueles que me incentivaram, ainda mais, por achar que eu não fosse capaz;
em especial à minha família, a qual eu dedico este trabalho.*

Agradecimentos

A todos que contribuíram para que eu pudesse realizar este trabalho.

A toda minha família (esposa, pai, mãe, irmão, . . .). Todos vocês foram de fundamental importância para que este trabalho se concretizasse em especial minha esposa Gisele.

Ao meu orientador, Winder por tudo, por acreditar que sou capaz, pelo incentivo, pela paciência, pela orientação e pelas oportunidades. Por me ensinar não só física, mas valores que um homem deve carregar por toda sua vida, por mostrar a Natureza de uma forma diferente e pelas discussões e trocas de idéias excepcionais.

Aos professores Winder A. Moura-Melo, Afrânio P. Rodrigues, Oswaldo Del Cima, Daniel H.T. Franco e Lucas Mól, pelas discussões, trabalhos, troca de idéias, orientações e cursos.

Ao departamento de física da UFV, professores, funcionários e colegas de pós-graduação.

A todos amigos que, para não ser injusto, prefiro não citar nomes.

Aos colegas de pós-graduação pelas discussões e almoços, pelas perguntas sempre pertinentes e pela ajuda para entendermos a física.

A UFV e a cidade de Viçosa por me acolher durante todos estes anos e a UFV-CRP por colaborar com a conclusão do meu doutorado.

A todos aqueles que se dedicaram a ciência e transmitiram suas descobertas para que outros pudessem compartilhar do conhecimento científico.

Por fim, mas não de menor grado agradeço ao povo brasileiro por me dar a oportunidade de estudar em uma universidade pública e em especial ao povo das Minas Gerais, pelo apoio financeiro concedido através da Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Minas Gerais (Fapemig) durante o tempo que tive bolsa.

Sumário

Notações e Convenções	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
Introdução e Motivação	1
1 Grafeno: uma breve introdução	13
1.1 Propriedades elementares do grafeno	13
1.2 Férmions de Dirac no grafeno	18
1.3 Interação spin-órbita no grafeno	26
2 Isolantes Topológicos: uma breve introdução	32
2.1 Isolantes	32
2.2 O efeito Hall quantizado	34
2.3 Isolante spin Hall quantizado	38
2.4 Isolantes Topológicos em 3D	46
2.5 Resposta Eletromagnética dos IT	52
3 Espalhamento dos portadores de carga no grafeno induzidos por defeitos na rede	60
3.1 Dinâmica dos portadores de carga em uma folha de grafeno não simplesmente conexa	60
3.2 Dinâmica dos portadores de carga na presença de defeitos pentagonais e heptagonais	67

4	Isolante Topológico Cônico	76
4.1	Efeito Hall no IT cônico	77
4.2	Efeito magnetoelétrico topológico e gravitação	82
4.3	Cargas imagem induzidas no cone	87
5	Isolantes Topológicos com domínios magnéticos na superfície	91
6	Conclusões e perspectivas	99
A	A equação de Dirac em (2+1) dimensões	103
A.1	Férmions em 2+1 dimensões	103
A.2	Soluções da equação de Dirac em 2+1 dimensões	108
B	Isolantes Topológicos e Teoria de Campos Topológica	111
C	Gravitação em (2+1) Dimensões	117
C.1	Equações de campo clássicas	117
C.2	Efeito Aharonov-Bohm gravitacional	122
C.3	Equação de Dirac em um cone	124
	Referências Bibliográficas	126

Notações e Convenções

- O sistema de unidades SI é utilizado nas principais equações. Em equações onde as unidades não prejudicam a compreensão, unidades naturais são usadas, assim, por exemplo, $\hbar = c = 1$;
- \hbar , h e c correspondem a constante de Planck dividida por 2π , a constante de Planck e a velocidade da luz no vácuo respectivamente.
- σ representa as matrizes de Pauli, σ^x , σ^y e σ^z .
- Índices gregos μ, ν, α, \dots assumem os valores 0, 1, 2; índices latinos i, j, k, \dots assumem os valores 1, 2; A convenção de soma de Einstein é utilizada: índices contraídos em um mesmo termo de uma equação devem ser somados.
- x é padrão para as coordenadas espaço-temporais em 2+1 dimensões $x^\mu = (t, \vec{r}) = (t, x, y)$ e os operadores diferenciais são $\partial_\mu = (\partial_t, \partial_x, \partial_y)$, $\partial^\mu = (\partial_t, -\partial_x, -\partial_y)$, $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}, \dots$
- EHQI = Efeito Hall Quantizado Inteiro.
- EHQS = Efeito Hall Quantizado de Spin.
- ISHQ = Isolante Spin Hall Quântico.
- TCT = Teoria de Campos Topológica.
- Outras definições e termos que aparecem são esclarecidos ao longo do texto.

Resumo

FONSECA, Jakson Miranda, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2012. **Algumas contribuições ao estudo do Grafeno e dos Isolantes Topológicos.** Orientador: Winder Alexander de Moura Melo. Coorientadores: Afrânio Rodrigues Pereira, Lucas Álvares da Silva Mol e Daniel Heber Teodoro Franco.

Nesta tese são estudados grafeno e isolantes topológicos. No caso do grafeno é considerado o espalhamento das quasepartículas por defeitos topológicos representados por buracos, pentágonos e heptágonos. No caso de buracos os desvios de fase da função de onda são obtidos e em baixas concentrações são irrelevantes para o transporte eletrônico, determinando uma contribuição negligenciável para a resistividade. Quando pentágonos e heptágonos são introduzidos na rede e a corrente fermiônica é restrita para mover próxima a estes, essa é espalhada com um ângulo que depende do número de defeitos e do lado que a corrente passa. O efeito magnetoelétrico topológico é considerado em um isolante topológico cônico quando uma carga q está próxima do ápice. A corrente Hall induzida na superfície do cone é determinada. É considerado também um efeito Aharonov-Bohm gravitacional nesta geometria onde as componentes da função de onda ganham um desvio de fase quando transportadas paralelamente em torno do ápice do cone. Uma corrente movendo-se em direção ao ápice (ou base) do cone aparece devido a este efeito, levando a uma polarização elétrica do isolante topológico cônico. Este efeito pode ser detectado, por exemplo, por meio da carga Hall acumulada próxima ao ápice. Também é analisada a modificação induzida no espectro dos estados superficiais quando o isolante topológico é coberto por um ferromagneto com magnetização tipo-vórtice. São considerados a possibilidade de estados discretos ligados e espalhados e é encontrado que uma massa não é induzida diretamente para os portadores superficiais.

Abstract

FONSECA, Jakson Miranda, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2012. **Some contributions to study of Graphene and Topological Insulators.** Adviser: Winder Alexander de Moura Melo. Co-Advisers: Afrânio Rodrigues Pereira, Lucas Álvares da Silva Mol and Daniel Heber Teodoro Franco.

In this thesis we study graphene and topological insulators. In the case of graphene, we study the scattering of quasiparticles by topological defects, represented by holes, pentagons and heptagons. For the case of holes, we obtain the phase shift and found that at low concentration they appear to be irrelevant for the electron transport, giving a negligible contribution to the resistivity. Whenever pentagons and heptagons are introduced into the lattice and the fermionic current is constrained to move near one of them we realize that such a current is scattered with an angle that depends on the number of pentagons and on the side the current taken. We consider the topological magnetoelectric effect on a conical topological insulator when a point charge q is near the cone apex. The Hall current induced on the cone surface is determined. We also study a kind of gravitational Aharonov-Bohm effect in this geometry and realize a phase difference between the components of the wavefunctions upon closed parallel transport around the cone tip. Concretely, a net current owing towards cone apex (or bottom) shows up, yielding electric polarization of the conical topological insulator. Such an effect may be detected, for instance, by means of the net accumulated Hall charge near the apex. We also analyzed the modification induced on the surface spectrum when a topological insulator is coated with an ferromagnet with magnetization like-vortex. We consider the possibility of bound discrete states and unbound continuous states and found that a mass is not directly induced in the surface carriers.

Introdução e Motivação

A Física da Matéria Condensada (FMC) é a parte da Física que estuda sistemas de muitas partículas, nos estados condensados, sólidos ou líquidos. Quando se estuda sistemas de muitas partículas (da ordem de 10^{23}) novos conceitos físicos e novas leis físicas que governam o comportamento coletivo desses sistemas podem surgir. Aspectos que permitem entender como a ordem emerge em tais sistemas constituídos de simples partículas como íons, momentos magnéticos, átomos ou elétrons e, como eles interagem uns com os outros são objetivos de estudo da FMC [1].

As correlações entre as diversas partículas, átomos ou moléculas que compõem o sistema, podem conduzir a modos coletivos que possuem suas próprias excitações elementares (excitações acima do estado de mais baixa energia) as quais muitas vezes apresentam propriedades físicas muito distintas daquelas observadas em partículas elementares conhecidas na natureza [2]. Por exemplo, em um sólido as excitações de mais baixa energia (ondas sonoras) são os movimentos coletivos dos átomos. Tais ondas são denominadas fônons e dessa forma um novo mundo governado por um novo tipo de partícula chamada fônon emerge, sendo as leis físicas que descrevem as interações entre essas novas partículas completamente distintas daquelas que descreviam os átomos constituintes do sólido original. Este é um dos muitos exemplos de fenômenos emergentes, onde o comportamento coletivo dos vários graus de liberdade (elétrons e íons do sólido) fortemente interagentes é o responsável por esses fenômenos. As leis que governam as quasepartículas e as excitações coletivas são muito diferentes das leis que governam os elétrons e íons originais [1].

Os paradigmas de Landau são largamente utilizados em FMC: a teoria dos líquidos de Fermi e a teoria da quebra de simetria (transições de fase). A teoria do líquido de

Fermi descreve metais, isolantes, semicondutores, supercondutores, superfluidos e materiais magnéticos. Já a teoria da quebra de simetrias de Landau nos diz que a existência de diferentes fases da matéria está associada à existência de diferentes simetrias em cada fase, sendo a transição de fase uma transição que muda a simetria. Assim a FMC descreve as diferentes fases da matéria por meio de suas simetrias, sejam elas quebradas ou não. Por exemplo, a cristalização da água em gelo quebra a simetria translacional, o ordenamento magnético de spins quebra a simetria rotacional e a fase supercondutora quebra a simetria de calibre. Essa teoria descreve quase todas as fases conhecidas da matéria tais como: sólida, superfluidica, ferromagnética, antiferromagnética e supercondutora, bem como descreve todas as transições de fase entre elas. Uma teoria de campos efetiva, geralmente chamada de teoria de Ginzburg-Landau pode ser formulada para descrever essas diferentes fases da matéria. Tal teoria é determinada por propriedades gerais tais como a dimensionalidade e a simetria do parâmetro de ordem que caracteriza a fase e determina uma descrição universal dos estados quânticos da matéria [3].

Porém, no início dos anos 80 um novo estado da matéria conhecido como Efeito Hall Quântico (EHQ) (inteiro e fracional) foi descoberto e verificou-se que os paradigmas de Landau não se aplicavam a este novo sistema, ensinando-nos que há um novo princípio organizacional da matéria diferente dos discutidos acima chamado de ordem topológica [4, 5]. O EHQ ocorre quando elétrons confinados a duas dimensões são submetidos a um forte campo magnético perpendicular ao plano do seu movimento e a um campo elétrico transversal ao campo magnético. As órbitas dos elétrons são quantizadas nos chamados níveis de Landau. Se N níveis de Landau são cheios e o restante vazios, então, um *gap* de energia separa os estados ocupados dos vazios, como em um material isolante, mas ao contrário de um isolante um campo elétrico produz uma corrente ao longo das bordas do material, cujo sentido depende da orientação do campo magnético. Os estados da borda do material que conduzem esta corrente são diferentes dos estados ordinários da matéria porque eles persistem mesmo na presença de impurezas e não se dissipam como em um condutor convencional. O EHQ veio a ser o primeiro exemplo de estado quântico da matéria que é topologicamente distinto de todos os estados da matéria conhecidos previamente [5].

A quantização precisa da condutividade Hall é explicada pelo fato que ela é um invariante topológico: só pode assumir valores inteiros, em unidades de e^2/h , independente dos detalhes do material, como sua forma geométrica e tipo de átomos constituintes [4]. Os matemáticos introduziram o conceito de topologia e seus invariantes para classificar diferentes objetos em classes amplas onde os detalhes geométricos dos objetos não são importantes [6]. Por exemplo, superfícies bidimensionais são classificadas pelo número de buracos que elas possuem ou o seu *genus*. A superfície de uma esfera é topologicamente equivalente à superfície de um cubo ou um elipsóide, pois um pode ser deformado suave e continuamente até o outro, sem criar buracos na superfície. Similarmente uma xícara de café é topologicamente equivalente a uma rosquinha com um furo no meio ou um toro, (figura 1), pois ambos podem ser deformados suavemente um no outro.

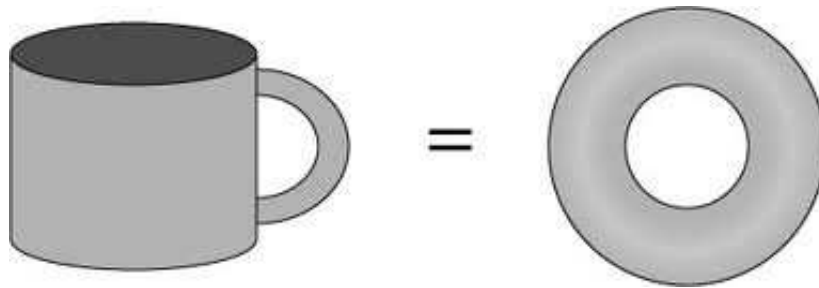


Figura 1: Uma xícara de café é topologicamente equivalente a um toro pois ambos possuem o mesmo número de buracos ($genus = 1$) e podem ser deformados um no outro. (Fonte: [skullsinthestars.com/2010/10/10/twisting-light-into-a-mobius-strip/.](http://skullsinthestars.com/2010/10/10/twisting-light-into-a-mobius-strip/))

Do ponto de vista matemático, a classificação topológica foca em distinções fundamentais entre as formas e descarta pequenos detalhes, sendo a deformação suave do objeto (aquela que não rasga ou fura o objeto) o conceito fundamental para agrupá-lo de acordo com esta classificação. Já em física, pode-se considerar, por exemplo, Hamiltonianas de sistemas de muitas partículas com um *gap* de energia entre o estado fundamental e os estados excitados e o conceito de deformação suave é definido como uma mudança adiabática na Hamiltoniana ou em algum parâmetro dela que não fecha o *gap* de energia [5].

Os estados topológicos da matéria são estados caracterizados por certas quantida-

des que são topologicamente invariantes, no sentido definido acima [4]. O único estado topológico da matéria conhecido até 2005 era o EHQ, porém nos últimos anos foi proposto teoricamente que estados de borda condutores e protegidos topologicamente, como aqueles do EHQ, poderiam ser encontrados no contorno de isolantes bidimensionais ou na superfície de isolantes tridimensionais com uma grande interação spin-órbita. Tais materiais foram então chamados de Isolantes Topológicos (IT), pois possuem um interior (*bulk*) que é isolante e estados condutores em sua borda que são invariantes sob pequenas deformações do material [5]. Nestes materiais a interação entre o spin dos elétrons e o campo magnético criado pelos átomos (interação spin-órbita) faz o papel de um campo magnético externo. Como resultado desta interação elétrons com spin de sinal oposto propagam em sentidos contrários nas bordas do material. Estes estados da matéria são invariantes sob Reversão Temporal¹. Todos isolantes encontrados na natureza que são invariantes sob Reversão Temporal e com um estado fundamental não degenerado se enquadram em duas classes topológicas distintas, uma trivial, onde os estados da superfície² são isolantes, e uma topologicamente não trivial, onde o interior do material possui um *gap*, sendo um isolante de banda, e os estados da superfície são condutores com um *gap* nulo. Neste caso o transporte é realizado por férmions de Dirac, que são partículas cuja relação de dispersão é linear, sendo, portanto descritas por uma equação similar a equação de Dirac em uma ou duas dimensões³. Note que em tais materiais a dinâmica dos portadores de carga superficiais não é governada pela equação de Schrödinger, mas sim por uma equação semelhante à equação de Dirac, que governa a dinâmica de partículas relativísticas. Bons artigos de revisão são as referências [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15].

As propriedades topológicas de tais materiais se manifestam mais drasticamente quando a simetria de Reversão Temporal é preservada no interior do material e violada em

¹Isto quer dizer que a Hamiltoniana que descreve o sistema é invariante sob tal operação. Esta é uma operação que, classicamente, corresponde apenas a inverter o sentido de fluxo do tempo $t \rightarrow -t$. Já, quanticamente, ela é implementada no espaço de Hilbert por meio de um operador antiunitário Θ [7, 8].

²O termo superfície usado aqui se refere a borda do material caso ele seja bidimensional ou à superfície mesmo, caso ele seja tridimensional.

³Aqui aparece um fenômeno de emergência pois férmions com massa nula, que são distintos de todos os constituintes do material, emergem em sua superfície.

sua superfície, por exemplo, pela adição de impurezas magnéticas na superfície do material. Nesse caso o material torna-se isolante no interior e na superfície, mas ainda é distinto de um isolante convencional. Por exemplo, as equações de Maxwell que descrevem a dinâmica dos campos elétricos e magnéticos são drasticamente modificadas por um termo topológico nesse caso. Este termo topológico possui um coeficiente que é quantizado, similarmente como no caso do EHQ [16]. A possibilidade de abrir um *gap* na superfície do material quebrando a simetria de reversão temporal leva a vários efeitos surpreendentes como monopolos magnéticos induzidos no interior do material por uma carga elétrica externa [17], a possibilidade de se criar férmions de Majorana devido a um efeito de proximidade a um supercondutor [18, 19], anyons⁴ [20], dentre outras propostas teóricas que podem ser úteis em eventuais aplicações destes materiais.

Outro assunto, que tem atraído muito a atenção da comunidade científica nos últimos anos e foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 2010 é o grafeno. Grafeno é o nome dado a uma única camada de átomos de carbono densamente empacotados em uma rede hexagonal [21, 22, 23]. Este material tem sido estudado teoricamente por mais de sessenta anos [24, 25, 26], mas apenas como ponto de partida para se entender e descrever propriedades de compostos baseados em muitos átomos de carbono como diamante, grafite, nanotubos e fulerenos, (veja a figura 2).

Por muito tempo acreditou-se que cristais eminentemente bidimensionais não poderiam existir livremente na natureza sendo muito instáveis termodinamicamente como argumentado por Landau e Peierls, há mais de 70 anos. Porém, a descoberta do grafeno em 2004, por um grupo da Universidade de Manchester liderado por Andre Geim e Kostya Novoselov⁵, utilizando uma técnica chamada clivagem micromecânica [28, 29] mostrou algo surpreendente: cristais bidimensionais existem e são estáveis em condições ambientes. O

⁴Anyons são partículas que possuem spin fracionário distinto de múltiplos de $\frac{h}{2}$ e obedecem a uma estatística fracional. Quando duas partículas idênticas trocam de posição ou uma gira em torno de outra a função de onda do sistema adquire uma fase $\psi \rightarrow e^{i\theta}\psi$, sendo que $\theta = \pi$ para férmions (estatística fermiônica), $\theta = 2\pi$ para bósons (estatística bosônica) e no caso de anyons θ pode assumir qualquer valor diferente de π e 2π .

⁵Os trabalhos de ambos os autores no desenvolvimento de técnicas para obtenção de cristais bidimensionais culminou com o recebimento do Prêmio Nobel de 2010.

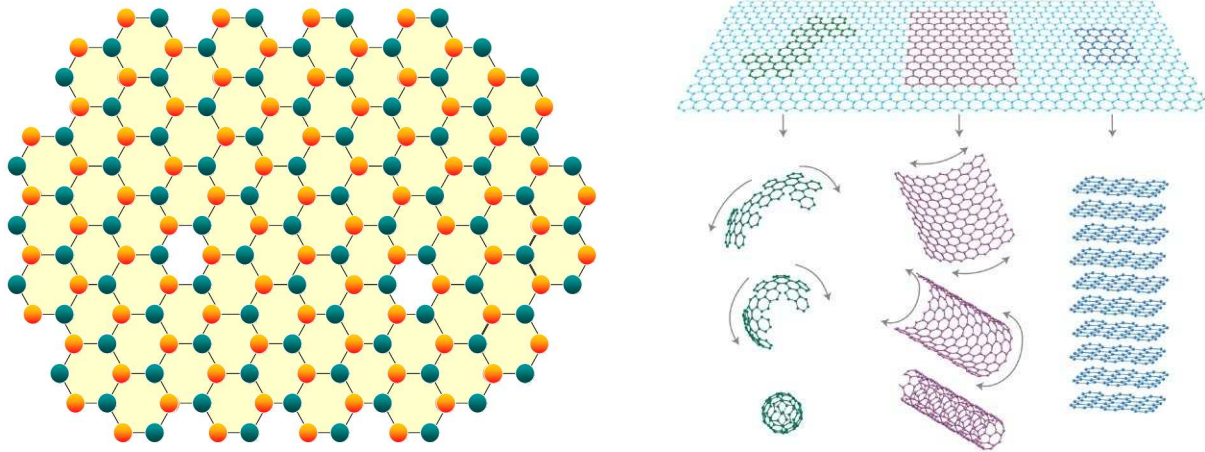


Figura 2: Esquerda: Grafeno mostrando os átomos de carbono arranjados em uma rede hexagonal que pode ser visualizada como composta de duas sub-redes triangulares (círculos verdes e vermelhos). Direita: Grafeno é a “mãe” de todos os outros alótropos do carbono, como mostrado na figura, a partir do grafeno se constrói o fulereno, nanotubos e o grafite. (Fonte: referências [27] e [21].)

método de clivagem micromecânica permite obter folhas de grafeno de alta qualidade com até $100\mu m$ de tamanho. A estabilidade do grafeno em condições ambientes é fascinante, pois o teorema de Mermin-Wagner [30] estabelece que não deve existir ordem de longo alcance em $2D$ em temperaturas finitas. De fato, em um cristal bidimensional o número de fônons diverge em baixas temperaturas e as amplitudes de deslocamento dos átomos que compõem o material, calculados em uma aproximação harmônica, torna-se comparável à distância interatômica em qualquer temperatura finita, destruindo o material [21]. Assim uma membrana flexível como o grafeno em um espaço tridimensional deveria se enrolar devido às flutuações de longos comprimentos de ondas. Entretanto, estudos têm demonstrado que tais flutuações podem ser suprimidas devido a acoplamentos anarmônicos (não-lineares) entre os modos de vibração que curvam e esticam o material [21]. Desse modo, membranas cristalinas bidimensionais podem existir, mas devem ser onduladas ou enrugadas como na figura 3.

Após sua descoberta, o interesse no grafeno cresceu substancialmente devido ao seu grande potencial de aplicação em eletrônica e outras áreas [31]. Este potencial surge de suas propriedades eletrônicas excepcionais, não encontradas em nenhum outro material conhecido até o momento. Uma de suas propriedades marcantes é que as excitações de mais

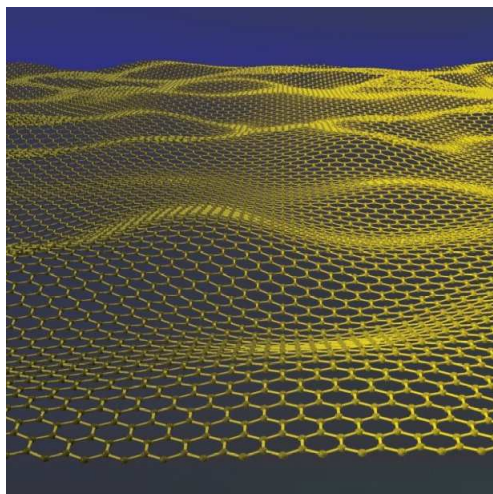


Figura 3: Ondulações presentes no grafeno em qualquer temperatura finita para garantir sua estabilidade bidimensional. (Fonte: nanotechweb.org.)

baixa energia se comportam como elétrons sem massa e possuem uma relação de dispersão linear entre energia e momento, sendo assim, descritas por uma equação análoga à equação de Dirac para partículas sem massa em $(2 + 1)$ dimensões⁶. Grafeno exibe transporte balístico e um efeito Hall anômalo onde os níveis de Landau para estados com energia nula possuem metade da degenerescência dos demais níveis de Landau, com energia diferente de zero [23]. Este EHQ anômalo no grafeno é a evidência mais direta para se concluir que os portadores são férmions de Dirac sem massa (detalhes no capítulo 1). Outra propriedade notável no grafeno é a ausência de localização por barreiras de potenciais como aquelas induzidas por impurezas [23]. Devido ao espectro linear dos portadores as barreiras se tornam transparentes não exibindo localização de Anderson como em condutores convencionais [23].

Grafeno também fornece uma inesperada ponte entre a FMC e a Eletrodinâmica Quântica (QED), isto devido à descrição dos seus portadores de carga por meio de uma equação semelhante à equação de Dirac. Vários fenômenos preditos na QED [33, 32] e difíceis de serem observados em altas energias podem ser observados no grafeno, por exem-

⁶ $(2 + 1)$ dimensões quer dizer 2 dimensões espaciais e 1 temporal, sendo esta uma notação mais comum em Mecânica Quântica Relativística [32, 2].

plo medindo suas propriedades eletrônicas, já que a escala de energia no grafeno é bem menor que em altas energias [34]. Várias propostas para se testar alguns fenômenos preditos, mas ainda não observados na QED tem sido feitas; algumas já realizadas confirmando as previsões da QED no grafeno [34], enquanto outras ainda encontram-se sob investigação como o paradoxo de Klein [35, 36, 34], polarização do vácuo [37] e colapso atômico⁷ [38].

Todas estas propriedades discutidas acima fazem do grafeno e dos Isolantes Topológicos, materiais que podem vir a revolucionar a ciência e a tecnologia nos próximos anos [31]. Talvez, as aplicações tecnológicas de curto prazo sejam na eletrônica, onde as possibilidades de aplicações destes materiais são imensas devido as suas propriedades extraordinárias. Inúmeras possibilidades como fluxo de corrente sem dissipação, corrente eletrônica spin-polarizada e controle de propriedades eletrônicas com luz colocam estes materiais como fortes candidatos a substituírem o silício nos dispositivos eletrônicos e instigam pesquisadores a criarem novos componentes eletrônicos que possam usufruir de tais propriedades. Recentemente, em 2010, pesquisadores da IBM (International Business Machines) construíram um transistor de grafeno que bateu o recorde mundial de velocidade, operando a 300 GHz. Um outro grupo da IBM construiu um circuito integrado usando equipamentos industriais e componentes de grafeno [39]. O circuito consiste de um único transistor de grafeno com um par de indutores integrados em uma pastilha de carbeto de silício (SiC). O circuito funciona como um misturador de frequências, operando a 10 GHz. Misturadores de frequência são utilizados em sistema de comunicação por rádio, por exemplo, nas redes de comunicações sem fios. O próximo passo da pesquisa será otimizar o transistor, para que ele opere a velocidades mais altas, e projetar circuitos mais complexos [39].

Propostas interessantes de aplicação do grafeno também vêm ocorrendo em áreas biológicas e biomédicas, como sua utilização na forma de suporte para o crescimento de ossos, na construção de circuitos biológicos com neurônios e em sequenciamento de DNA [40, 41]. Neste último caso, a idéia é fazer um buraco na folha de grafeno, por exemplo,

⁷Paradoxo de Klein, polarização do vácuo e colapso atômico são efeitos associados a natureza quântica e relativística do elétron e do campo eletromagnético são previsões da eletrodinâmica quântica, porém, no âmbito de altas energias a observação destes fenômenos requer uma escala alta de energias.

usando um feixe de elétrons e atravessar a fita de DNA por esse buraco e medir a corrente que flui entre as bordas da folha de grafeno, como mostra a figura 4. Quando as diferentes bases da fita de DNA atravessam a folha de grafeno a resistência elétrica do material muda, mudando a corrente medida, dessa forma as flutuações na corrente podem ser usadas para rapidamente sequenciar a fita de DNA [40]. Um fato que pode ser relevante na concretização desta proposta é que o buraco introduzido na folha implica numa contribuição irrisória para a resistividade, não tendo portanto, qualquer influência nos resultados de medida da corrente associados à fita de DNA. Que isso de fato ocorre é um dos resultados que obtivemos em artigo recente e será melhor discutido no Capítulo 3 [27, 42].

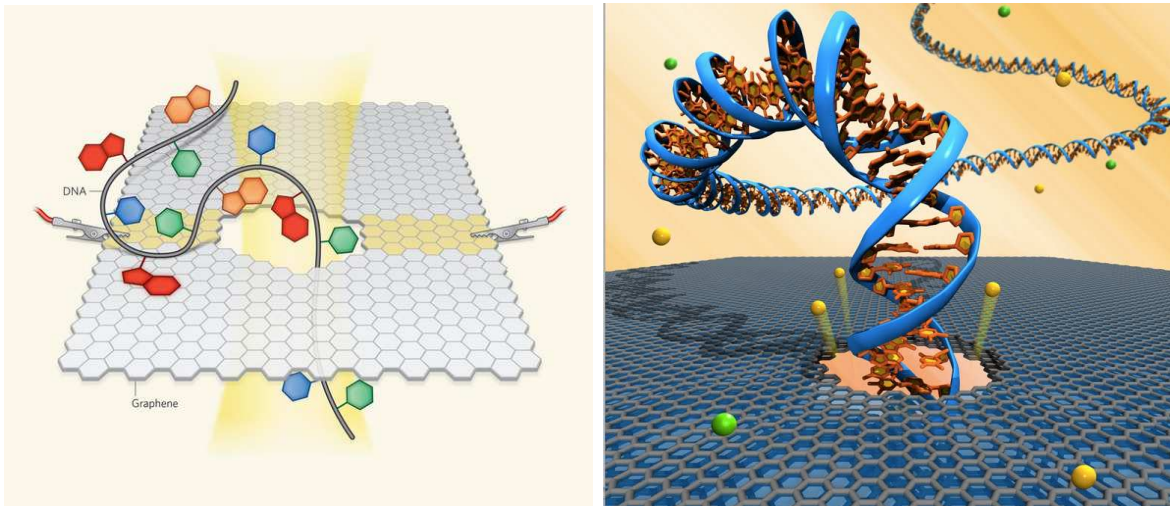


Figura 4: Proposta de método para sequenciamento de DNA. Uma fita de DNA é passada por um buraco feito na folha de grafeno e a corrente entre os contatos é medida, sendo que cada base nitrogenada do DNA muda o valor da corrente. (Fonte: referências [40] e [41].)

O impacto do grafeno e dos isolantes topológicos na comunidade científica pode ser avaliado pelo número de publicações e citações da base de dados da *Web of Science*. Por exemplo, o primeiro artigo sobre grafeno, referência [28], publicado em 2004 na revista *Science* possui mais de 6000 citações; palavras de busca como *graphene* retornam mais de 16.000 resultados. No caso dos IT, os artigos fundamentais que discutem o assunto em 2D possuem mais de 1000 citações e palavras de busca como *Topological Insulators*, *Quantum*

Spin Hall Effect remetem mais de 4.000 resultados⁸.

Nesta Tese de Doutorado é feito um estudo do comportamento das quasepartículas do grafeno na presença de defeitos na estrutura cristalina do material, levando em consideração três tipos de defeitos: buracos, pentágonos e heptágonos. Todos esses defeitos podem ser incorporados por remover ou inserir alguns átomos de carbono na rede [27, 42]. Entender como estes defeitos modificam as propriedades de transporte do grafeno é crucial para se construir futuros dispositivos eletrônicos usando grafeno.

A presença de defeitos pentagonais (ou heptagonais) induz uma curvatura local positiva (ou negativa) na folha de grafeno. Em algumas situações, os portadores de carga se movendo na presença de defeitos pentagonais (heptagonais) é análogo a férmions se movendo em um espaço-tempo com $(2 + 1)$ dimensões na presença de uma massa puntiforme positiva (“negativa”). A analogia surge do fato de que a curvatura, ou campo gravitacional, produzida por uma massa puntiforme positiva (“negativa”) é idêntica à curvatura produzida na folha de grafeno por defeitos pentagonais (heptagonais). Assim, pode-se empregar resultados da gravitação para analisar alguns efeitos relacionados aos portadores de carga na presença destes defeitos. Por exemplo, na presença de pentágonos e heptágonos encontramos que os desvios de fase dos portadores, movendo-se próximos destes defeitos, depende somente do número de pentágonos ou heptágonos na folha de grafeno e são idênticos para portadores das sub-redes A e B . Já no caso de buracos, que não induzem curvatura na folha de grafeno, os desvios de fase calculados para os elétrons espalhados mostram que em baixas concentrações tais defeitos são irrelevantes para o transporte de carga dando contribuição insignificante para a resistividade. Estes resultados fazem parte dos trabalhos originais desta Tese [27, 42] e serão amplamente discutidos posteriormente.

Outro tema abordado nesta Tese, é o estudo da dinâmica dos portadores na superfície de Isolante Topológicos tridimensionais na presença de campos elétricos e magnéticos externos ou induzidos por impurezas [43]. Como discutido anteriormente, a presença de impurezas magnéticas gera um *gap* de energia na relação de dispersão dos estados superficiais tornando os elétrons de Dirac massivos. A presença de tais impurezas modifica muito a

⁸Dados obtidos em 11 de janeiro de 2012. É interessante salientar que os resultados de busca da *Web of Science* só englobam artigos publicados em revistas indexadas.

dinâmica dos portadores, como pode ser visto em trabalhos relacionados com o assunto [44, 45, 46, 47, 48]. Dessa forma, consideramos algumas configurações magnéticas na superfície do material e analisamos quais os efeitos na dinâmica dos portadores [43].

Resultados obtidos mostram que uma configuração de campo magnético na superfície do IT tipo-vórtice não induz uma massa na relação de dispersão como no caso de um campo magnético perpendicular à superfície, mas cria um acoplamento de níveis de energia com o momento angular dos portadores e permite a possibilidade de estados eletrônicos ligados e espalhados na superfície. Outro assunto em estudo é a possibilidade, e consequências, de se construir um IT em forma cônica e analisar efeitos como a resposta magnetoelétrica topológica nesta geometria, como a indução de monopolos magnéticos [49], de modo similar ao que ocorre em uma superfície plana, bem como, a possibilidade de um efeito do tipo Aharonov-Bohm associado à geometria do cone [49] como ocorre, por exemplo, no grafeno cônico [50]. Este último efeito é um efeito previsto pela teoria da relatividade geral de Einstein em espaço-tempo com $(2 + 1)$ dimensões. A dinâmica dos portadores de carga na superfície de um IT cônico é idêntica àquela de férmions com massa nula no campo gravitacional de uma massa puntiforme em $(2+1)$ dimensões e alguns fenômenos, previstos por esta teoria, podem vir a ser observados em IT cônico. Particularmente, é feita uma previsão que a polarização do IT cônico muda de sentido quando se considera cones com diferentes ângulos de abertura [49]. Este efeito pode ser utilizado para se testar previsões da relatividade geral em $(2+1)$ dimensões e também para se verificar as propriedades topológicas do IT cônico [49].

Esta Tese de Doutorado é organizada em seis capítulos e três apêndices. Nos dois primeiros capítulos são discutidos alguns aspectos básicos sobre estrutura eletrônica e propriedades gerais do grafeno e dos Isolantes Topológicos. O material apresentado nestes capítulos serve de *background* para a apresentação dos resultados originais desta Tese nos capítulos 3, 4 e 5. No capítulo 3 os resultados obtidos no estudo do grafeno são discutidos. Este capítulo é baseado nas duas publicações realizadas sobre este assunto [27, 42]. A partir do capítulo 4 são discutidos os resultados obtidos no estudo dos IT tendo como foco o efeito magnetoelétrico topológico em um IT cônico [49]. Já no capítulo 5 são discutidos

alguns resultados sobre a dinâmica dos portadores na superfície do IT quando ela é coberta por um filme magnético que possui uma magnetização tipo-vórtice [43]. No capítulo 6 são apresentadas as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros desta Tese. Para tornar essa um pouco mais didática e deixar o texto mais completo alguns tópicos que não são muito comuns em Física da matéria Condensada foram discutidos em três apêndices. No apêndice A é apresentada uma discussão sobre a teoria de Dirac do elétron em $(2+1)$ dimensões, sendo este assunto essencial para a compressão da dinâmica dos portadores de carga no grafeno e nos IT. No apêndice B discute-se uma formulação alternativa a teoria de bandas na descrição dos IT que é a teoria de campos topológica. Esta formulação unifica a descrição destes materiais de na presença de interações ou desordem e no caso sem interação reduz-se a teoria de bandas para IT. Por fim no apêndice C é feita uma discussão sobre a Relatividade Geral de Einstein em $(2+1)$ dimensões. Este assunto é amplamente utilizado na obtenção de alguns resultados dos capítulos 3 e 4, merecendo assim especial atenção nesta Tese de Doutorado.

Capítulo 1

Grafeno: uma breve introdução

Grafeno é o primeiro material eminentemente bidimensional produzido em laboratório. Ele é constituído de átomos de carbono e possui propriedades de transporte distintas daquelas observadas em outros materiais. Seus portadores de carga, sob alguns aspectos, possuem um comportamento relativístico que confere a este material um sistema que cria uma “ponte” entre física da matéria condensada e física de altas energias, como Eletrodinâmica Quântica e Relatividade Geral. Neste capítulo será apresentada uma introdução às propriedades eletrônicas do grafeno indispensáveis para a compreensão dos resultados obtidos e também importantes para um bom entendimento dos isolantes topológicos.

1.1 Propriedades elementares do grafeno

Grafeno é constituído por átomos de carbono arranjados em uma rede hexagonal bidimensional ($2D$), figura 1.1; pode, também, ser visto como um plano de átomos retirado do grafite [28, 51]. A estrutura hexagonal do grafeno pode ser visualizada como duas sub-redes triangulares superpostas ou como uma rede triangular com dois átomos de carbono por célula unitária, veja a figura 1.1. Os átomos de carbono são ligados a seus vizinhos por meio de fortes ligações covalentes com uma distância interatômica de $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ que

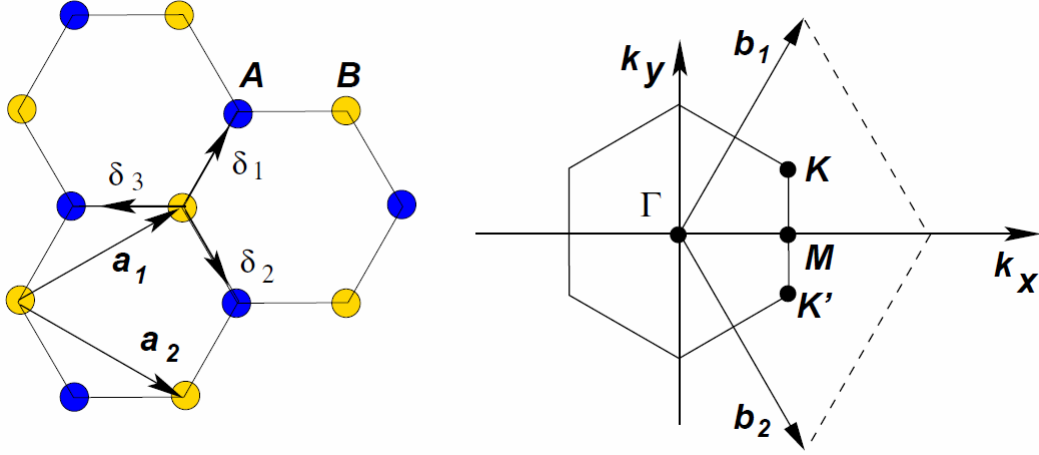


Figura 1.1: Rede hexagonal do grafeno mostrando suas sub-redes triangulares compostas pelos átomos A e B . Os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores da rede e os três vetores $\vec{\delta}_i$ ligam os átomos de uma sub-rede aos seus três primeiros vizinhos da outra sub-rede. À direita, é mostrada a primeira zona de Brillouin. \vec{b}_1 e \vec{b}_2 são os vetores da rede recíproca. Os cones de Dirac localizam-se nos pontos K e K' . (Fonte: referência [23].)

confere ao material uma alta rigidez. Os vetores da rede podem ser escritos na forma [23]:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (1.1)$$

Estes vetores geram qualquer uma das duas sub-redes triangulares do grafeno. A primeira zona de Brillouin do grafeno também é hexagonal (figura 1.1) devido à simetria da rede, e os vetores da rede recíproca são dados por [23]:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (1.2)$$

A zona de Brillouin do grafeno possui seis pontos onde a banda de valência toca a banda de condução, como pode ser visto na figura 1.2. Destes seis pontos apenas dois deles, chamados de \vec{K} e \vec{K}' , são independentes, os demais sendo equivalentes a estes por operações de simetria da rede. Estes pontos são mostrados na figura 1.1 e são de extrema importância na descrição do grafeno, como será visto posteriormente. Suas posições no espaço recíproco são [23]:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (1.3)$$

Estes pontos são chamados de pontos de Dirac, pois como veremos posteriormente a descrição dos portadores de carga com momento próximo a estes pontos é feita pela equação de Dirac em $(2 + 1)$ dimensões com massa nula. A descrição dos elétrons no grafeno é feita por meio de uma Hamiltoniana que descreve as fortes ligações químicas existentes no grafeno. Considerando que os elétrons podem “saltar” entre os primeiros e segundos átomos vizinhos, a Hamiltoniana toma a forma (considerando $\hbar = 1$):

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (a_{\sigma, i}^\dagger b_{\sigma, j} + b_{\sigma, i}^\dagger a_{\sigma, j}) - t' \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma, i}^\dagger a_{\sigma, j} + b_{\sigma, i}^\dagger b_{\sigma, j} + a_{\sigma, j}^\dagger a_{\sigma, i} + b_{\sigma, j}^\dagger b_{\sigma, i}) \quad (1.4)$$

onde $a_{i, \sigma}$ ($a_{i, \sigma}^\dagger$) aniquila (cria) um elétron com spin σ ($\sigma = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$) que se encontra no sítio \vec{R}_i da sub-rede A. Uma definição equivalente a esta é usada para a sub-rede B com os operadores $b_{i, \sigma}$. O parâmetro t é chamado de energia de “salto” entre diferentes sub-redes e é dado aproximadamente por $t \approx 2,8$ eV e t' é a energia de “salto” entre segundos vizinhos ou entre átomos da mesma sub-rede. As bandas de energia obtidas desta Hamiltoniana foram investigadas pela primeira vez em 1947 por P. R. Wallace sendo dadas por [24]:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}), \quad (1.5)$$

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right). \quad (1.6)$$

O sinal $+$ é para a banda de condução e o sinal $-$ para a banda de valência. Note que o espectro dos portadores é simétrico em torno do valor $E = 0$ se o parâmetro t' for nulo. Isto quer dizer que existe uma simetria entre elétrons e buracos neste caso. No caso de $t' \neq 0$ esta simetria é quebrada. Na figura 1.2 é mostrada a estrutura de bandas do grafeno com t e t' diferentes de zero. Na mesma figura é mostrada uma ampliação das bandas de energia próximo a um dos pontos de Dirac onde as bandas se tocam.

A dispersão linear da estrutura de bandas pode ser obtida expandindo-se o espectro (1.5) em torno de um dos pontos de Dirac \vec{K} ou \vec{K}' . Considerando $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$ com $|\vec{q}| \ll |\vec{K}|$ obtêm-se:

$$E_{\pm}(\vec{q}) = \pm v_F |\vec{q}| + \mathcal{O}[(q/K)^2], \quad (1.7)$$

sendo \vec{q} o momento eletrônico medido em torno do ponto de Dirac e v_F é a velocidade de Fermi dada por $v_F = \frac{3ta}{2} \simeq 1 \times 10^6$ m/s $\approx c/300$. A velocidade de Fermi é a velocidade

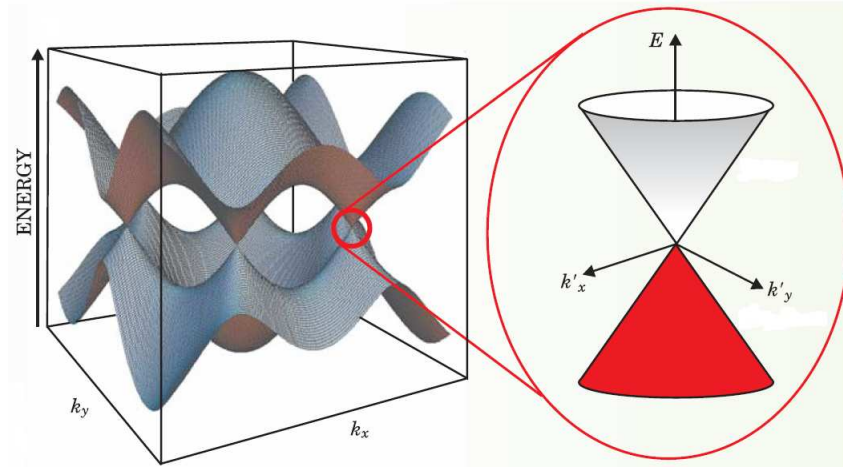


Figura 1.2: Estrutura de bandas de energia do grafeno mostrando as bandas de valência e condução. A ampliação em torno de um dos pontos onde as bandas se tocam mostra o espectro cônico linear sem *gap* em torno dessa região. (Fonte: referência [52].)

média com a qual os portadores que se encontram na borda da superfície de Fermi se deslocam. Esta velocidade não é constante para todos os portadores devido a flutuações térmicas, quânticas e a interações existentes entre os portadores de carga, mas seu valor desvia pouco do valor dado acima.

Grafeno é um material muito peculiar que possui propriedades distintas dos demais sistemas de matéria condensada. Em geral a relação entre energia e momento eletrônico em cristais é dada pela relação clássica $E(\vec{q}) = q^2/2m^*$, onde m^* é a massa efetiva dos portadores de carga. Esta relação quadrática entre energia e momento leva a uma velocidade de Fermi dependente da energia dos portadores, $v_F = k/m = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$, sendo assim, a velocidade dos elétrons muda consideravelmente com a energia, sendo esta situação muito distinta daquela encontrada no grafeno onde a velocidade de Fermi é constante, independente da energia dos portadores. Outra peculiaridade do espectro linear do grafeno é que os portadores de carga não são descritos pela equação de Schrödinger como nos sistemas que possuem uma dispersão quadrática. No grafeno a dinâmica dos portadores em baixas energias é descrita pela equação de Dirac em (2+1) dimensões para partículas com massa nula. Na próxima seção este fato será demonstrado. Uma consequência imediata deste es-

pectro linear do grafeno é que a massa cíclotron dos portadores depende da raiz quadrada da densidade de estados eletrônicos. Em um tratamento semiclássico [53] a massa cíclotron m^* é definida como:

$$m^* = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\partial A(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F}, \quad (1.8)$$

com $A(E)$ a área no espaço recíproco determinada pelas órbitas dos portadores na presença de um campo magnético externo perpendicular a superfície. Da relação de dispersão (1.7) obtêm-se:

$$A(E) = \pi q^2 = \pi \frac{E^2}{v_F^2}, \quad (1.9)$$

Esta equação leva a massa cíclotron dada por:

$$m^* = \frac{E_F}{v_F^2} = \frac{k_F}{v_F}. \quad (1.10)$$

O momento de Fermi é relacionado a densidade de elétrons no grafeno por $n = k_F^2/\pi$, onde está incluída a contribuição dos dois pontos de Dirac e o spin dos portadores. A massa cíclotron pode ser escrita em termos de n :

$$m^* = \frac{\sqrt{\pi n}}{v_F}. \quad (1.11)$$

Medidas da massa cíclotron em função da densidade de elétrons podem ser utilizadas para se verificar a validade da equação acima. A figura (1.3) mostra um ajuste de dados experimentais com a equação (1.11). Este ajuste permite obter uma estimativa da velocidade de Fermi como sendo $v_F \approx 10^6$ m/s e do parâmetro $t \approx 3$ eV. A observação desta dependência da massa cíclotron com \sqrt{n} constitui a evidência mais direta para a existência de portadores de carga com massa nula e espectro linear no grafeno [51, 23]. Note que no caso de um espectro parabólico (ou quadrático) como ocorre quando a descrição dos portadores é realizada por meio da equação de Schrödinger a massa cíclotron é constante, não dependendo de n .

A densidade de estados eletrônicos no grafeno pode ser obtida analiticamente quando se considera $t' = 0$ na equação (1.4). Próximo aos pontos de Dirac, onde a dispersão dos estados é linear a densidade de estados eletrônicos por célula unitária é dada por:

$$\rho(E) = \frac{2A_c |E|}{\pi v_F^2}, \quad (1.12)$$

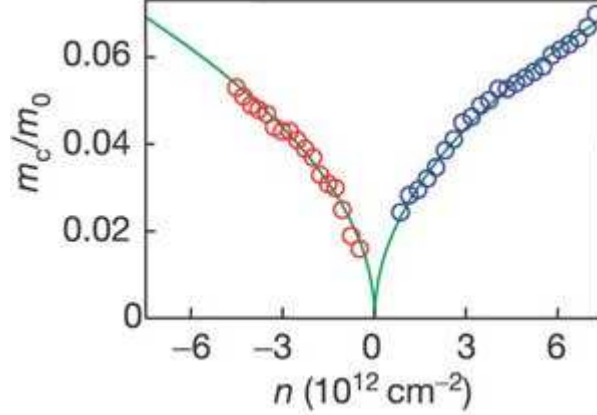


Figura 1.3: Massa cíclotron no grafeno em função da densidade de portadores de carga n . Densidade de portadores positiva corresponde a elétrons e negativa a buracos. m_0 é massa do elétron livre e os círculos correspondem a dados experimentais. (Fonte: referência [51].)

onde A_c é a área da célula unitária dada por $A_c = 3\sqrt{3}a^2/2$. A equação acima inclui uma degenerescência de quatro devido ao spin dos portadores e a degenerescência entre os dois cones de Dirac, também chamada de degenerescência de vale.

1.2 Férmions de Dirac no grafeno

Devido ao fato do espectro de bandas do grafeno ser linear próximo aos pontos de Dirac, a descrição efetiva dos portadores de carga (elétrons) neste sistema é muito peculiar e distinta da maioria dos sistemas de matéria condensada. A dinâmica dos portadores para longos comprimentos de onda (ou baixas energias) é descrita pela equação de Dirac para partículas com massa nula em (2+1) dimensões [54, 23, 51, 55]. Para ver isto considere a Hamiltoniana (1.4) com $t' = 0$. Seja a transformada de Fourier dos operadores aniquilação dada por:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} a(\vec{k}), \quad (1.13)$$

onde N_c é o número de células unitárias, \vec{R}_n a posição dos átomos da sub-rede A e o índice n indica a posição dos átomos na rede. Usando esta transformação o operador a_n pode ser escrito como uma soma de dois termos, que surgem da expansão da soma de Fourier em

torno dos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . Esta expansão é feita em torno destes pontos, pois é nessa região do espectro que se localizam os estados de mais baixa energia. Esta expansão da série de Fourier produz uma representação para o campo a_n como uma soma de dois novos campos da forma:

$$a_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} a_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} a_{2n}(\vec{q}'), \quad (1.14)$$

onde os índices 1 e 2 referem-se aos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' respectivamente, e o momento \vec{q} (\vec{q}') é medido em relação aos pontos de Dirac \vec{K} (\vec{K}'). Uma expansão similar vale para os operadores de aniquilação da sub-rede B:

$$b_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} b_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} b_{2n}(\vec{q}'), \quad (1.15)$$

Considera-se que os novos campos introduzidos acima a_{in} e b_{in} ($i = 1, 2$) variam de maneira muito lenta sobre a célula unitária da rede do grafeno. Para se obter uma teoria efetiva válida próxima aos pontos de Dirac deve-se utilizar as representações (1.14) e (1.15) na Hamiltoniana (1.4), considerando $t' = 0$ e expandir os operadores até ordens lineares nas posições dos átomos R_n . Isto quer dizer que para o átomo localizado no sítio n considera-se sua contribuição na expansão de Fourier acima apenas devido aos três sítios vizinhos que se localizam nas posições $\vec{R}_n + \vec{\delta}_i$, sendo os $\vec{\delta}_i$ dados por (figura 1.1):

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = -a(1, 0). \quad (1.16)$$

Usando o fato que $\sum_{\vec{\delta}} e^{\pm\vec{K}\cdot\vec{\delta}} = \sum_{\vec{\delta}} e^{\pm\vec{K}'\cdot\vec{\delta}} = 0$, a Hamiltoniana (1.4) fica na forma:

$$H = -i\hbar v_F \int dx dy [\psi_1^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \psi_1(\vec{r}) + \psi_2^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma}^* \cdot \vec{\nabla} \psi_2(\vec{r})]. \quad (1.17)$$

com as matrizes de Pauli dadas por $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\vec{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ e os espinores $\psi = (a_i, b_i)^T$ e $\psi_i^\dagger = (a_i^\dagger, b_i^\dagger)$, $i = 1, 2$. Observe que a Hamiltoniana (1.17) é constituída de duas cópias da Hamiltoniana de Dirac em (2+1) dimensões com massa nula, uma descrevendo a dinâmica dos portadores próximo ao ponto \vec{K} e a outra próxima ao ponto \vec{K}' .

A equação de Dirac em (2+1) dimensões descreve a dinâmica de férmions, sendo uma equação de onda relativística que possui invariância relativística sendo típica de altas energias como na física das partículas elementares [33, 32]. Aqui surge uma peculiaridade

do grafeno que diferentemente da maioria dos sistema de matéria condensada sua dinâmica em baixas energias é descrita por uma equação de onda relativística e não pela equação de Schrödinger, como a maioria dos sistemas. No apêndice A são apresentadas algumas propriedades desta equação, uma vez que ela não é muito familiar em FMC.

Na Hamiltoniana efetiva (1.17) aparece a quantidade $v_F = 3at/2$ que é a velocidade de Fermi. A velocidade de Fermi não é uma velocidade limite para os portadores e nem uma velocidade invariante, o termo análogo aqui é usado devido ao fato de que, se a Hamiltoniana fosse realmente a Hamiltoniana relativística de Dirac em $(2 + 1)D$ a velocidade nesta equação (1.17) deveria ser a da luz, por isso é preciso tomar um pouco de cuidado quando se diz que os portadores de carga são descritos por uma equação de onda relativística.

Utilizando uma linguagem de funções de onda que descrevem um único portador de carga, os portadores que se encontram próximos ao ponto de Dirac \vec{K} são descritos pela equação de Dirac [23, 56, 57, 58, 59]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\psi, \quad (1.18)$$

sendo $H_K = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}$, $\vec{q} = -i\hbar\vec{\nabla}$ e as autoenergias $E = \pm v_F q$. Em forma matricial têm-se:

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

A função de onda plana para a Hamiltoniana (1.18) é dada por:

$$\psi_{\pm K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta(\vec{q})/2} \\ \pm e^{i\theta(\vec{q})/2} \end{pmatrix} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = u_{\pm}(\vec{q})e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (1.20)$$

com $\theta(\vec{q}) = \arctan(q_y/q_x)$ e o sinal $+$ é para a banda de condução, descrevendo elétrons, e o $-$ para a banda de valência, descrevendo buracos.

Já os portadores que se encontram próximo ao ponto de Dirac \vec{K}' são descritos pela equação:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi = -i\hbar v_F \vec{\sigma}^* \cdot \vec{\nabla}\psi, \quad (1.21)$$

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x + i\partial_y \\ \partial_x - i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix}, \quad (1.22)$$

sendo $H_{K'} = v_F \vec{\sigma}^* \cdot \vec{q} = H_K^*$, e as auto-energias $E = \pm v_F q$. A função de onda para os portadores com momento \vec{q}' próximo a \vec{K}' é:

$$\psi_{\pm K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta(\vec{q}')/2} \\ \pm e^{-i\theta(\vec{q}')/2} \end{pmatrix} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}} = u_{\pm}(\vec{q}') e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}}. \quad (1.23)$$

Note que se a fase das funções de onda acima for rodada por 2π , o que equivale a fazer a mudança $\theta(\vec{q}') \rightarrow \theta(\vec{q}') + 2\pi$ os espinores mudam de sinal indicando uma fase de Berry de π . Esta fase de Berry não está associada ao spin verdadeiro dos portadores de carga no grafeno, mas sim ao seu pseudospin.

Dessa descrição vê-se que o grafeno é um semicondutor sem *gap* de energia (ou um semimetal). No caso de amostras puras e neutras o nível de Fermi, que separa os estados ocupados dos vazios, se localiza em $E = 0$, que é exatamente a energia onde a banda de condução toca a banda de valência, veja a figura 1.2. As quasepartículas no grafeno (portadores de carga) podem ser vistas como elétrons que perderam sua massa ou neutrinos de massa nula que adquiriram a carga do elétron. Este espectro faz do grafeno um material com propriedades únicas, que dentre outras características possui uma massa efetiva nula, fato este que só ocorre em cristais bidimensionais arranjados em uma rede hexagonal. Na rede hexagonal do grafeno, as duas componentes do espinor $|\psi\rangle$ descrevem o que é chamado de pseudospin e não o spin verdadeiro das quasepartículas. O pseudospin é um índice indicando a contribuição de cada sub-rede triangular A e B para a dinâmica eletrônica do sistema, sendo o pseudospin similar ao spin (*up* e *down*) do elétron. É comum considerar os graus de liberdade das sub-redes (pseudospin) com a sub-rede A sendo o “spin-up”, $|+\rangle$ e a sub-rede B sendo o “down”, $|-\rangle$, isto é:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Uma quantidade relevante para se caracterizar autofunções de partículas com massa nula, como os portadores de carga no grafeno é a helicidade ou quiralidade das partículas que é a projeção do spin ao longo do momento. Na ausência de um termo de massa, o operador de helicidade comuta com a Hamiltoniana de Dirac, sendo portanto um bom número quântico. No caso do grafeno isto é definido como a projeção do pseudo spin dos

portadores ao longo do momento [23, 57]. O operador que define a helicidade é:

$$\hat{h} = \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|}. \quad (1.25)$$

Quando atuando na função de onda (1.20) ele determina $\hat{h}\psi_{\vec{K}} = \pm\psi_{\vec{K}}$ o que significa que elétrons possuem helicidade positiva e buracos helicidade negativa. Quando se considera portadores próximos ao ponto \vec{K}' com função de onda (1.23) a helicidade se inverte, com elétrons tendo helicidade negativa e buracos positiva. A interpretação física deste operador é que o pseudo spin dos portadores de carga descritos por $\vec{\sigma}$ é sempre, paralelo, ou antiparalelo ao momento \vec{q} dos portadores [57]. Note que a quiralidade não é uma simetria exata do problema, ou seja, não é conservada em qualquer situação, sendo \hat{h} um bom número quântico para se descrever os portadores apenas enquanto a descrição efetiva (1.18) e (1.21) for válida. Por exemplo, em uma situação onde o acoplamento entre segundos vizinhos na rede do grafeno for importante, a descrição efetiva apresentada anteriormente terá correções proporcionais a q^2 e o operador de helicidade não mais comutará com a Hamiltoniana. Outra situação em que isso ocorre é na presença de um *gap* de energia que produz um termo de massa na Hamiltoniana de Dirac que não comuta com \hat{h} [56].

Embora o espectro linear seja importante ele não é a única característica essencial do grafeno, que determina a descrição dos portadores por meio da equação de Dirac. Quando a energia dos portadores é positiva, (acima de zero) os estados transportando corrente no grafeno são usuais, partículas carregadas negativamente como elétrons. Se a banda de valência não está completamente cheia, seus estados eletrônicos desocupados que possuem energia negativa comportam-se como quasepartículas carregadas positivamente (buracos na linguagem de Física do estado sólido, que são vistos como os equivalentes dos pósitrons em matéria condensada). No grafeno, elétrons e buracos são conectados, exibindo propriedades de simetria análogas àquelas de conjugação de carga na QED, em contraste com materiais usuais onde elétrons e buracos são descritos por duas equações de Schrödinger diferentes que não possuem conexões e apresentam massas efetivas diferentes [34].

Elétrons são partículas elementares que possuem massa diferente de zero. No caso de sólidos, como no grafeno, a interação entre os íons constituintes do material leva as partículas portadoras de carga a possuírem uma massa efetiva nula, que é um parâmetro que

descreve como um elétron (ou um buraco), com um determinado vetor de onda, responde a campos de força aplicados. Quando a massa efetiva é nula, como no grafeno, significa que a velocidade dos elétrons permanece constante. As propriedades de transporte tornam-se então mais parecidas com aquelas de partículas fundamentais com massa nula, como o fóton e o gráviton.

Uma vez que $v_F \ll c$, o grafeno é um sistema relativístico lento ou uma versão da eletrodinâmica quântica (QED) com um acoplamento forte pois a constante de acoplamento no grafeno $e^2/\hbar v_F \approx 2$ é muito maior que o análogo da constante de estrutura fina da QED $e^2/\hbar c \approx 1/137$. Todas estas propriedades fazem do grafeno um sistema muito interessante que possibilita uma maneira para se testar vários fenômenos da QED [34, 60], a baixas energias. Dentre estes fenômenos um extremamente difícil de se verificar em QED e facilmente realizável no grafeno é o paradoxo de Klein [35, 36]. Outro efeito peculiar, também chamado de anômalo que ocorre no grafeno é o efeito Hall. Ele pode ser observado no grafeno em temperatura ambiente e revela de maneira notável a presença de portadores de carga com massa nula [34, 61, 62, 56, 63].

Na presença de um campo magnético externo os níveis de energia para os portadores de carga no grafeno são dados por (veja o apêndice A):

$$E_n = \sqrt{2eB\hbar v_F^2(n + 1/2 \pm 1/2)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.26)$$

O sinal \pm está relacionando a quiralidade dos portadores de carga. Estes são os níveis de Landau para os portadores de carga. Note que em condutores com espectro parabólico a equação de Schrödinger leva a uma sequência de níveis de Landau dada por $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$, sendo ω_c a frequência de rotação do elétron no campo magnético (frequência cíclotron). A figura 1.4 mostra a sequência de níveis de Landau no grafeno e em condutores usuais, bem como a condutividade Hall e a resistividade longitudinal medidas no grafeno.

Uma peculiaridade importante dos níveis de Landau (1.26) para férmions com massa nula no grafeno é a existência de estados com energia nula. A presença destes estados leva a um efeito Hall anômalo no grafeno com uma condutividade Hall que possui quantização semi-inteira. Os patamares na condutividade Hall são espaçados em intervalos de e^2/h , porém no grafeno existem quatro tipos de férmions que contribuem para a

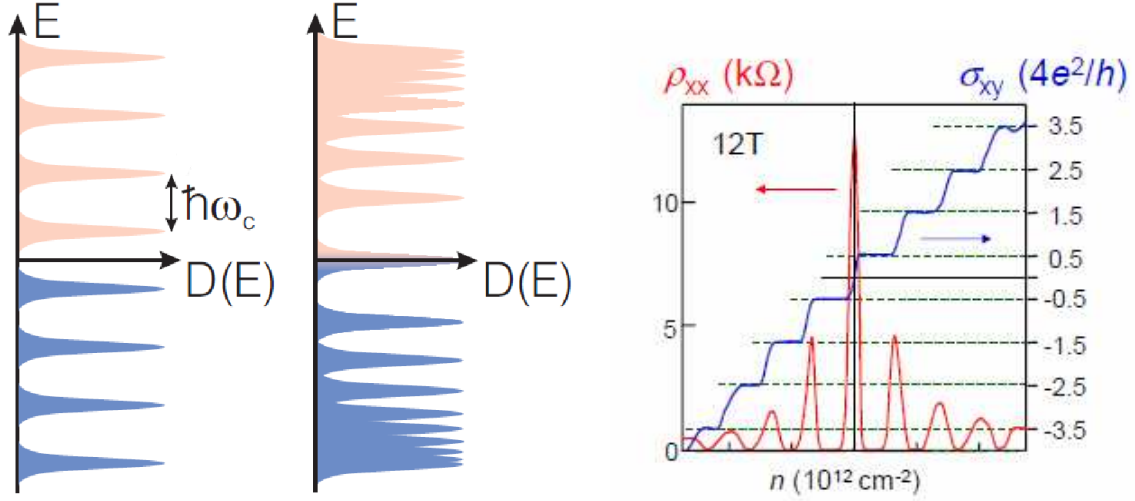


Figura 1.4: Esquerda: Níveis de Landau em condutores com espectro parabólico e no grafeno (centro). A sequência padrão da energia dos níveis de Landau em função da densidade de estados é $E_n \propto n + 1/2$, enquanto no grafeno esta sequência é $E_n \propto \sqrt{n}$. Note que existe um nível de Landau em $E = 0$ com metade dos estados ocupados por buracos e metade vazia. À direita a sequência de patamares na condutividade Hall (σ_{xy}) em função da concentração de portadores observada no grafeno e os picos na resistividade longitudinal (ρ_{xx}). (Fonte: referência [63].)

condução (2 em cada ponto de Dirac) e a condutividade deve ser multiplicada por quatro. Como o nível com energia nula possui metade dos seus estados ocupados a sequência de patamares no grafeno é desviada por 1/2 levando à quantização anômala:

$$\sigma_{xy} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.27)$$

Estes resultados estão de acordo com os resultados experimentais mostrados na figura 1.4. A descoberta deste efeito Hall com quantização semi-inteira no grafeno foi a evidência mais direta da presença de férmions de Dirac [34, 61, 62, 56, 63]. O nível de Landau com energia nula no grafeno tem propriedades topológicas que garantem a sua estabilidade. Isto pode ser obtido do teorema do índice de Atiyah-Singer [64, 34, 6] e diz, por exemplo que o número de estados com $E = 0$ quando expressos em termos do fluxo magnético total é um invariante topológico do sistema. Isso garante por exemplo que este efeito não é destruído pela presença de campos de calibre que se originam devido a tensões e deformações da folha de grafeno [60, 65]. Os estados que possuem $E = 0$ são sempre quirais, por razões topológicas, e isto significa que no grafeno somente portadores da sub-rede A ou B contribuem para estes

estados, dependendo do sinal do campo magnético externo [34].

Considerando-se o spin real das partículas portadoras de carga, no grafeno existem quatro tipos de portadores de carga, dois associados à sub-rede A (com “spin *up*” e “*down*”) e dois associados à sub-rede B . Assim, uma descrição completa da dinâmica dos portadores no grafeno próximo a qualquer um dos pontos de Dirac necessitaria de um spinor com quatro componentes¹. A descrição baseada nas equações (1.18) e (1.21) não leva em conta o efeito do spin verdadeiro das partículas, e na ausência de campos magnéticos externos fortes é uma aproximação muito boa pois, devido ao pequeno número atômico do carbono, a interação spin-órbita nesse material é muito fraca e pode ser tratada como uma pequena perturbação. Na próxima seção discutiremos mais sobre esta interação e veremos que ela leva a novos estados quânticos da matéria que possuem estabilidade topológica.

Uma descrição efetiva do grafeno que inclua em uma mesma Hamiltoniana a contribuição dos dois pontos de Dirac para a dinâmica dos portadores, necessita de um espinor com quatro componentes. Observe que as Hamiltonianas (1.18) e (1.21) podem ser escritas na forma:

$$H_{K(K')} = v_F(\sigma^x q_x \pm \sigma^y q_y), \quad (1.28)$$

onde o sinal $+$ ($-$) se aplica ao vale \vec{K} (\vec{K}'). Introduzindo o pseudo spin entre vales no grafeno descrito pelo operador $\vec{\tau}$ a Hamiltoniana (1.28) acima pode ser escrita em uma forma compacta como:

$$H = v_F(1 \otimes \sigma^x q_x + \tau^z \otimes \sigma^y q_y). \quad (1.29)$$

O espinor ψ agora possui 4 componentes que descreve a contribuição das duas sub-redes e dos dois vales para a dinâmica dos portadores. $\vec{\sigma}$ descreve o pseudo spin associado as sub-redes A e B e $\vec{\tau}$ o pseudo spin associado aos dois vales \vec{K} e \vec{K}' . Em forma matricial o

¹Posteriormente, veremos que uma grande diferença entre grafeno e os estados superficiais de um isolante topológico reside no fato de que existe apenas um tipo de portador na superfície dos isolantes topológicos e que a interação spin-órbita nos isolantes topológicos é muito forte sendo indispensável na sua descrição, entretanto ambos os materiais possuem um espectro de energia linear para os estados superficiais o que rende uma dinâmica efetiva de portadores semelhante nos dois casos. Mais diferenças e semelhanças entre estes dois materiais serão discutidas na próxima seção

problema de autovalor $H\Psi = E\Psi$ se torna:

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y & 0 & 0 \\ q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_x + iq_y \\ 0 & 0 & q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Esta formulação é interessante pois a teoria fica invariante sob Paridade e Reversão Temporal. Estas duas operações de simetria no grafeno causam uma troca entre os pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' [23].

1.3 Interação spin-órbita no grafeno

A interação entre o momento de dipolo magnético produzido pelo spin do elétron com o campo magnético interno produzido pelo átomo é chamada de interação spin-órbita. Este nome é devido ao fato do campo magnético interno de um átomo ser uma consequência do momento angular orbital do elétron, assim, o acoplamento é entre o spin do elétron com seu momento angular orbital. Para átomos com poucos elétrons esta interação é relativamente fraca, mas em átomos com muitos elétrons (grande número atômico Z) o campo magnético interno pode tornar-se grande e a interação pode ser forte. Este acoplamento entre o spin e o movimento orbital dos elétrons é um efeito relativístico que pode ser obtido da teoria de Dirac para o elétron [32]. Em compostos de carbono, como no grafeno, esta interação deve ser fraca pois o carbono é um elemento leve [23].

A Hamiltoniana de interação spin-órbita pode ser escrita como [7]:

$$H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m^2c} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \vec{S} \cdot (\nabla\Phi(x) \times \vec{p}), \quad (1.31)$$

sendo \vec{S} o operador de spin dos portadores $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ e $\Phi(x)$ é o potencial elétrico produzido pelo núcleo na órbita dos portadores. Esta interação muito conhecida em física atômica e molecular é uma consequência natural da teoria de Dirac do elétron, mas em física atômica e molecular ou estado sólido ela é geralmente introduzida como uma perturbação. Quando o potencial produzido pelo núcleo atômico é central a interação spin-órbita pode ser escrita

como:

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}, \quad (1.32)$$

em que \vec{L} é o momento angular orbital do elétron. A interação spin-órbita desvia os níveis de energia dos elétrons quebrando a degenerescência entre as componentes *up* e *down* do spin. As duas componentes do spin acoplam com sinais opostos ao movimento orbital, fato este que traz consequências muito interessantes em sólidos onde esta interação é forte.

A interação spin-órbita no grafeno leva a uma fase da matéria que possui uma classificação topológica distinta de um isolante de banda [66]. Esta interação leva ao Efeito Hall Quantizado de Spin (EHQS) onde spin e carga são transportados em estados metálicos sem *gap* na borda do material como no efeito Hall porém, a corrente de borda aqui é spin polarizada com cada componente do spin propagando-se em um sentido. De fato esta análise realizada em 2005 [66] foi o ponto de partida para a pesquisa por materiais com forte interação spin-órbita que exibem um EHQS. Uma descrição efetiva dos portadores de carga no grafeno próximo aos pontos de Dirac leva a Hamiltonianas 2×2 onde as componentes do espinor descrevem a contribuição de cada sub-rede para a condução. Para se considerar a contribuição das duas sub-redes e dos dois vales (pontos de Dirac) a descrição efetiva seria por meio de uma Hamiltoniana 4×4 sendo a função de onda spinores com quatro componentes. Duas componentes para o ponto K (sub-redes A e B) e duas para o ponto K' (sub-redes A e B) (2.15). Assim, existem quatro tipos de portadores no grafeno. Quando se considera a interação entre o spin e a órbita dos portadores cada um dos quatro tipos de portadores de carga sofre uma interação da forma (1.32) e a descrição completa do grafeno é feita por meio de uma Hamiltoniana 8×8 [67].

A Hamiltoniana que descreve a interação spin-órbita no grafeno é dada por [66]:

$$H_{SO} = \pm \Delta_{SO} \psi^\dagger \sigma_z S_z \psi, \quad (1.33)$$

onde o sinal $+$ ($-$) é para os portadores associados ao ponto de Dirac K (K'), Δ_{SO} é a intensidade da interação spin órbita. S_z é a matriz de Pauli representando o spin físico (não o pseudo spin) dos elétrons no grafeno $S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$. A interação spin-órbita no grafeno tem como efeito acoplar estados eletrônicos de diferentes sub-redes (A e B) com a mesma componente de spin (*up* ou *down*) e pertencendo ao mesmo ponto de Dirac (K ou K'). Desse

modo, a Hamiltoniana 8×8 pode ser reduzida a quatro Hamiltonianas 2×2 independentes, uma para spin *up* no ponto K (K') e outra para spin *down* no ponto K (K'). De fato isto é possível porque $[H_{SO}, S_z] = 0$ implicando que as componentes do spin são separadamente conservadas neste sistema. Por exemplo a Hamiltoniana para portadores com spin *up* no ponto K é dada por [67]:

$$H\psi_K^\dagger = (-i\hbar v_F \sigma \cdot \nabla + \Delta_{SO} \sigma_z) \psi_K^\dagger = \begin{pmatrix} \Delta_{SO} & -i\hbar \nabla^- \\ -i\hbar \nabla^+ & -\Delta_{SO} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{(K)A}^\dagger \\ \psi_{(K)B}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

Nesta equação as matrizes de Pauli $\vec{\sigma}$ estão associadas ao pseudo spin dos portadores, isto é, portadores das sub-redes A e B, ambos com spin *up* e $\nabla^\pm = \partial_x \pm i\partial_y$.

Esta Hamiltoniana possui todas as simetrias da Hamiltoniana livre do grafeno (1.18), (1.21) e pode estar presente na sua descrição. A interação (1.33) leva a um desvio de energia nos estados eletrônicos dependente do spin dos portadores e possui sinais opostos para portadores em diferentes sub-redes, como pode ser visto na Hamiltoniana (1.34). O efeito desta interação é a abertura de um *gap* de energia entre as bandas de condução e valência, como uma massa efetiva positiva para os portadores da sub-rede A e negativa para os portadores da sub-rede B. Estados eletrônicos com spin *up* e momento eletrônico \vec{q} medido em relação ao ponto \vec{K} possuem energia dada por $E(\vec{q}) = \pm \sqrt{(\hbar v_F q)^2 + \Delta_{SO}^2}$ onde $+$ ($-$) se refere a banda de condução (valência). Observe que existe um *gap* de energia de $2\Delta_{SO}$ [66, 67].

Este *gap* de energia gerado pela interação spin-órbita possui sinais opostos nos dois pontos de Dirac. Este fato confere a esta fase com *gap* uma propriedade topológica distinta de uma fase com *gap* gerado por potenciais devido a substratos, tensões ou campos aplicados, pois estes teriam o mesmo sinal nos dois cones de Dirac. Para conectar adiabaticamente estas duas fases com *gap* deve-se passar por um ponto crítico onde o *gap* gerado pela interação spin-órbita anula-se em um dos dois pontos de Dirac. Como estas duas fases com *gap* não podem ser conectadas adiabaticamente sem passar por um estado sem *gap* elas pertencem a fases topológicas distintas da matéria. Isto é semelhante ao que ocorre no EHQI onde para conectar a fase Hall com um dado n ao vácuo deve-se passar por uma região sem *gap* na borda do material, caso contrário as duas fases (vácuo e EHQI)

pertenceriam a mesma classe topológica.

A Hamiltoniana de interação (1.33) preserva a simetria de reversão temporal (invariante), mas se ela for separada em duas, uma para cada componente S_z do spin, cada uma delas, separadamente, viola a simetria de reversão temporal [66, 68]. Haldane [68] mostrou que cada uma destas duas Hamiltonianas gera *gaps* de energia com sinais opostos nos dois pontos de Dirac, como aqui, e que em temperaturas bem abaixo da escala de energia do *gap* isto leva a uma condutância Hall quantizada com sinais opostos para cada ponto de Dirac:

$$\sigma_{xy} = \pm \frac{e^2}{h}. \quad (1.35)$$

Como os sinais dos *gaps* gerados por (1.33) possuem sinais opostos para spins opostos, um campo elétrico externo paralelo a folha de grafeno induz correntes elétricas transversas opostas que se propagam em sentidos opostos, para spin *up* e *down*. Isto leva a uma corrente de spins caracterizada por uma condutividade Hall de spin dada por [66]:

$$J_x^s = \sigma_{xy}^s E_y = \frac{\hbar}{2e} (J_x^\uparrow - J_x^\downarrow), \quad \sigma_{xy}^s = \frac{e}{2\pi}. \quad (1.36)$$

A origem por trás desta corrente spin-polarizada é a interação spin-órbita que permite um mecanismo para se produzir um efeito Hall quantizado de spin e sem a presença de um campo magnético externo. Esta fase da matéria ficou conhecida como Efeito Hall Quantizado de Spin (EHQS) e são novos estados topológicos da matéria. A condutividade Hall para a corrente de carga nesse sistema é zero. No próximo capítulo estes estados da matéria serão discutidos e sua generalização para três dimensões.

No grafeno pode existir outro tipo de interação spin-órbita, por exemplo, quando a simetria de inversão é violada por meio da interação com um substrato. Esta interação é conhecida como Rashba e não traz modificações significantes nas discussões acima, pois ela é muito mais fraca que a interação (1.33) [66].

Como ocorre no EHQI onde a ordem topológica do *bulk* impõe a presença de estados metálicos na borda, isto também ocorre aqui no grafeno com a corrente de spin (1.36) [66]. São estes estados metálicos que ocorrem no contorno do material que distinguem ele de um isolante convencional que não possui estes estados. A figura 1.5 mostra as bandas de energia para uma fita de grafeno unidimensional onde a interação spin-órbita é considerada. Estes

estados de borba não são quirais como ocorre no EHQI mas são spin polarizados com cada componente do spin propagando em uma direção. Este estados conectam os diferentes pontos de Dirac e se cruzam no centro da zona de Brillouin. Eles são protegidos pela simetria de reversão temporal no senso que formam um par de Kramers em $k_x = \pi/a$, cuja degenerescência não pode ser quebrada por perturbações que não quebram a simetria \mathcal{T} e espalhamento elástico contrário à propagação não pode ocorrer [66].

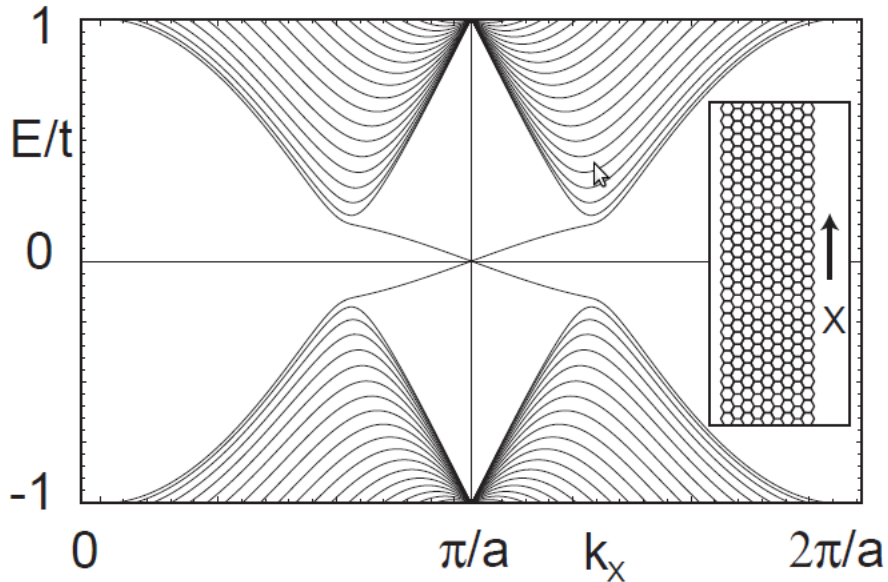


Figura 1.5: Bandas de energia de uma fita de grafeno unidimensional. Note a presença do *gap* de energia nos cones de Dirac e a presença de dois estados sem *gap* que se cruzam no centro da zona de Brillouin em $k_x = \pi/a$. Estes são os estados metálicos da borda responsáveis pela corrente spin-polarizada. t é o parâmetro que caracteriza a intensidade da interação entre vizinhos na rede do grafeno e a intensidade relativa entre a interação spin-órbita e a interação entre vizinhos é da ordem de 0.03. (Fonte: referência [66].)

Apesar de produzir estes efeitos no grafeno a interação spin-órbita (1.33) em compostos de grafite é muito fraca, sendo estimada a $2\Delta_{SO} \sim 2.4$ K. Já a interação do tipo Rashba é ainda mais fraca ~ 0.5 mK [66]. Dessa forma a observação destes efeitos no grafeno se torna muito difícil, porém foi este o ponto de partida para uma busca por materiais

que exibem este efeito mais pronunciadamente e também a busca por generalizações do EHQS em 3 dimensões [5, 13, 14, 15, 12]. No próximo capítulo este assunto será discutido detalhadamente.

Existem muitos outros aspectos interessantes e importantes na física do grafeno que provavelmente tornaram este material excepcional em suas aplicações em eletrônica. Bicamadas de grafeno têm sido muito estudadas e possuem um espectro parabólico com partículas quirais e muito recentemente [69] foi reportado na literatura um estudo de tricamadas de grafeno, que possuem propriedades semelhantes a monocamadas ou bicamadas, dependendo da forma em que são empilhadas, mostrando que este material ainda possui muitas propriedades para revelar. Interessados em mais detalhes sobre as propriedades do grafeno devem consultar os bons artigos de revisão [23, 56, 57, 58, 59, 21, 34].

Capítulo 2

Isolantes Topológicos: uma breve introdução

Isolantes topológicos são materiais isolantes no interior (*bulk*) e que possuem estados metálicos condutores na superfície protegidos pela simetria de Reversão Temporal [9]. Este novo estado da matéria foi primeiramente predito para ocorrer em poços quânticos de materiais bidimensionais onde ficou conhecido como Isolante Spin Hall Quântico (ISHQ) [70, 71, 72]. Posteriormente os isolantes topológicos tridimensionais foram preditos teoricamente, como uma generalização do ISHQ e foram então detectados experimentalmente [13]. Neste capítulo será feita uma discussão deste novo estado da matéria, que como o EHQ possui ordem topológica. Para tornar o texto mais didático discuti-se primeiro alguns aspectos de isolantes e do EHQ. Depois considera-se os IT em 2 e 3 dimensões e por fim algumas propriedades eletromagnéticas dos IT.

2.1 Isolantes

O estado isolante é o estado mais básico da matéria. Os isolantes mais simples são os isolantes atômicos onde todos os elétrons estão ligados a seus átomos em camadas fechadas. Tais materiais são eletricamente inertes, pois é necessário uma quantidade de energia relativamente elevada para fazer um elétron se deslocar. A mecânica quântica explica este e outros estados da matéria por meio da teoria de bandas de sólidos, que descreve a estru-

tura eletrônica dos materiais [53]. Esta teoria explora a simetria translacional do cristal para classificar os estados eletrônicos em termos do seu momento cristalino \vec{k} definido em uma zona de Brillouin periódica. A estrutura de bandas de um sólido é obtida da equação de Schrödinger com um potencial $U(\vec{r})$ que possui a simetria da rede cristalina devido a invariância translacional:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi_k(\vec{r}) = E\psi_k(\vec{r}). \quad (2.1)$$

Esta Hamiltoniana é chamada de Hamiltoniana de Bloch e os seus autoestados $\psi_k(\vec{r})$ definidos em uma única célula unitária do cristal são chamados de autoestados de Bloch. O teorema de Bloch estabelece que os autoestados de (2.1) são ondas planas multiplicadas por uma função $u_{n,k}(\vec{r})$ que possui a periodicidade da rede cristalina:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,k}(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Os autovalores $E_n(\vec{k})$ da Hamiltoniana do cristal $H(\vec{k})$ definem as bandas de energia, que juntas formam a estrutura de bandas do cristal, sendo n um índice que caracteriza a banda de energia. Cada estado eletrônico caracterizado por n e \vec{k} pode ser ocupado por dois elétrons com diferentes orientações de spin (*up* e *down*). Quando uma determinada quantidade destes níveis está ocupada duas situações distintas podem ocorrer. Na primeira delas uma certa quantidade de bandas podem ter todos os seus estados eletrônicos ocupados e as demais bandas completamente desocupadas. A diferença em energia entre o nível ocupado mais alto e o mais baixo desocupado, isto é, a diferença em energia entre o topo da última banda ocupada, chamada de banda de valência e a base da primeira banda desocupada, chamada de banda de condução é chamado de *gap* da banda. Neste caso quando a estrutura de bandas do sólido apresenta um *gap* ele é chamado de isolante (se a energia do *gap* for muito maior que $k_B T$) ou um semiconductor (se a energia do *gap* for comparável a $k_B T$). A figura (2.1) mostra um esquema da estrutura de bandas para um isolante. Na segunda situação um certo número de bandas pode estar parcialmente cheio. Quando isto ocorre a energia do mais alto estado ocupado coincide com a energia de Fermi e para cada banda parcialmente ocupada existe uma superfície no espaço dos momentos eletrônicos \vec{k} , que separa os estados ocupados dos vazios. O conjunto de todas

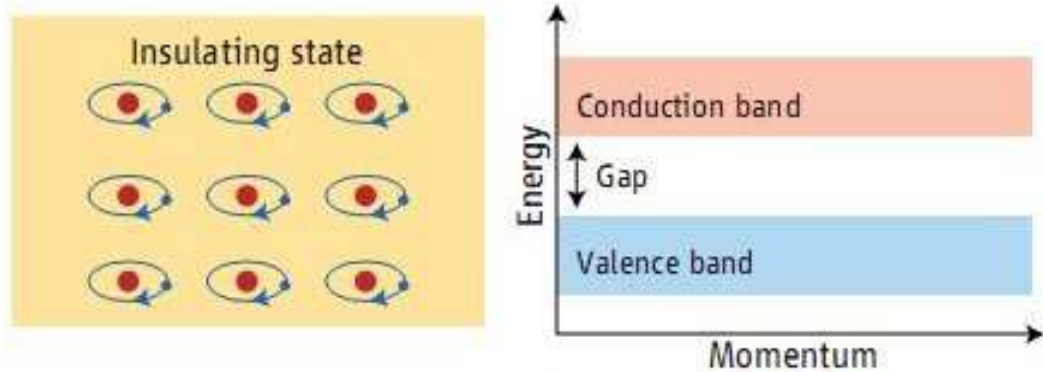


Figura 2.1: Esquema da estrutura de bandas de um isolante. O isolante é caracterizado por um *gap* de energia separando os estados eletrônicos ocupados e vazios. Todos os elétrons são ligados a seus íons sendo o sólido inerte ao fluxo de corrente. (Fonte: referência [10].)

estas superfícies constitui a superfície de Fermi do sólido. Quando ocorre a ausência de um *gap* entre os estados ocupados e vazios o sólido é dito ser um metal.

esta situação

Alguns isolantes exibem um *gap* grande e outros um *gap* pequeno. Pode-se imaginar, então, um processo que deforme a Hamiltoniana de um no outro sem fechar o *gap* de energia. Este processo define uma classe de equivalência topológica entre diferentes estados isolantes da matéria e, tais isolantes são todos equivalentes ao vácuo (que, de acordo com a teoria quântica relativística de Dirac, também possui um *gap* de energia para a criação de um par elétron-pósitron [32]). Dentro deste ponto de vista (*gap* de energia) todos os isolantes são equivalentes. Porém, nem todos os estados com *gap* de energia são equivalentes ao vácuo. Os contra exemplos desta situação são novos estados da matéria que possuem propriedades fascinantes e que tem atraído muita atenção nos últimos anos. O mais simples destes estados é o efeito Hall quantizado.

2.2 O efeito Hall quantizado

O Efeito Hall Quântizado Inteiro (EHQI) foi descoberto em 1980 [73, 4] e foi o primeiro estado da matéria a ter um *gap* de energia no interior, como um isolante de bandas,

mas que não é topologicamente equivalente ao vácuo, exibindo propriedades de transporte não-triviais [4]. Em particular a condutância transversal σ_{xy} é quantizada em (com precisão de uma parte por bilhão) múltiplos inteiros de e^2/h [4], apesar do *gap* de energia no *bulk*. A diferença entre um isolante de banda usual e o EHQ é uma propriedade topológica do *manifold* dos estados eletrônicos ocupados. A função de onda $\psi_{n,k}(\vec{k})$ que descreve os portadores de carga faz um mapeamento da zona de Brillouin, que em duas dimensões possui a topologia de um toro (T^2), devido a periodicidade do momento eletrônico \vec{k} , no espaço de Hilbert. Devido ao fato da topologia da zona de Brillouin não ser trivial é que surge a diferença entre um isolante como o vácuo (cuja topologia da zona de Brillouin é trivial) e o EHQI [4, 74, 75].

No efeito Hall a quantização das órbitas circulares dos elétrons devido ao campo magnético externo leva aos níveis de Landau, que possuem energia $E_m = (m + 1/2)\hbar\omega_C$, sendo ω_C a frequência cíclotron do movimento dos elétrons e m é inteiro. Os níveis de Landau podem ser vistos como bandas de energia para os elétrons e, se N níveis de Landau são preenchidos e o restante desocupados, um *gap* de energia separa os estados ocupados dos vazios, como em um isolante. Porém, nas bordas do material os elétrons possuem um movimento diferente daqueles do interior, porque as órbitas encontram a borda do material e não se fecham, “pulando” para outra órbita, veja o esquema na figura 2.2. Estes saltos na borda levam a estados eletrônicos que propagam pela borda do sistema em apenas uma direção, sendo quirais e não possuem energia quantizada. Dado que estes estados não possuem *gap* de energia, são metálicos e quirais, eles podem conduzir corrente elétrica sem serem espalhados por impurezas, pois não há estados propagando em sentido contrário. A única opção para os elétrons é propagar no mesmo sentido e sem perda de energia na forma de calor, pois não podem ser espalhados. Todos estes fatos são responsáveis pela quantização da condutividade Hall:

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.3)$$

Esta quantização foi medida com uma precisão de uma parte em 10^9 e é uma manifestação da natureza topológica de σ_{xy} (um invariante topológico do sistema).

Para discutir a diferença entre um isolante ordinário e o EHQ, caracterizado pela

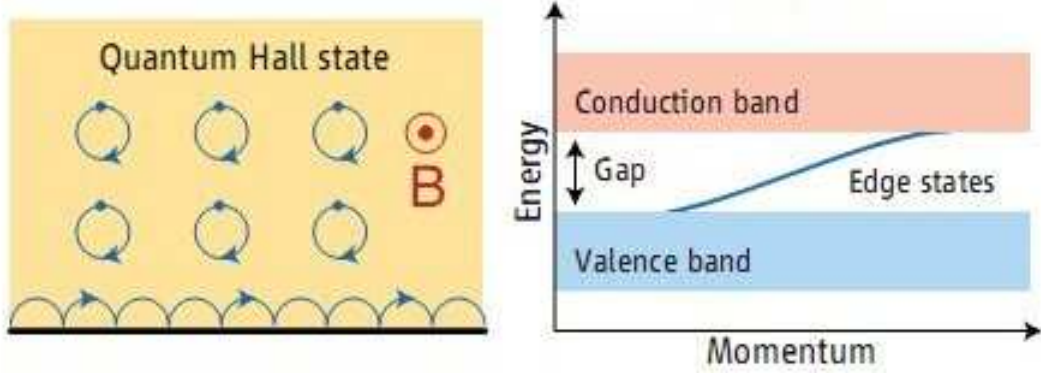


Figura 2.2: Esquema de estrutura de bandas do EHQ. Esquerda: o movimento circular dos elétrons, o qual é interrompido na borda, onde os portadores conduzem sem dissipação em um único sentido. Direita: esquema das bandas de energia mostrando o *gap* existente entre a última banda completamente cheia e a próxima que está completamente vazia e os estados de borda que ligam a banda de valência a banda de condução. (Fonte: referência [10].)

equação (2.3), vamos falar um pouco mais sobre os estados de Bloch. Considere uma função de onda de Bloch, que pode ser escrita na forma (2.2). Um conceito de fundamental importância em mecânica quântica é a chamada fase de Berry [76]. Considere um sistema quântico que encontra-se no estado fundamental (considere-o não-degenerado), então o teorema adiabático estabelece que se a Hamiltoniana que descreve o sistema muda lentamente, o sistema permanece no seu estado fundamental tempo-dependente. Porém, Berry [76] mostrou que o estado do sistema pode adquirir uma fase adicional, chamada de fase geométrica ou de Berry, além da fase dinâmica do sistema. Ele mostrou que quando a Hamiltoniana do sistema muda adiabaticamente em um caminho fechado no espaço dos parâmetros o estado do sistema adquire uma fase em relação ao estado inicial dada por:

$$\phi = \oint \vec{\mathcal{A}} \cdot d\vec{k}, \quad \vec{\mathcal{A}} = \langle \psi_k | -i\vec{\nabla}_k | \psi_k \rangle, \quad (2.4)$$

que pode ser escrita como uma integral de superfície da chamada curvatura de Berry $\vec{\mathcal{F}}$:

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}. \quad (2.5)$$

Associada à curvatura de Berry existe uma quantidade invariante em um sólido, que pode ser escrita como:

$$n = \sum_{\text{bandas ocupadas}} \int d^2k \mathcal{F} = \sum_{\text{bandas ocupadas}} \int d^2k \left(\left\langle \frac{\partial u}{\partial k_1} \middle| \frac{\partial u}{\partial k_2} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u}{\partial k_2} \middle| \frac{\partial u}{\partial k_1} \right\rangle \right), \quad (2.6)$$

sendo n um inteiro quantizado e u as funções de Bloch (2.2). A única restrição para que n seja quantizado é que haja um *gap* de energia separando as bandas ocupadas das vazias. Isto foi demonstrado pela primeira vez em 1982 por Thouless, Kohmoto, Nightingale e Den Nijs [4, 74] e é conhecido como invariante TKNN pois eles mostraram que a condutividade Hall, σ_{xy} , computada por meio da fórmula de Kubo para a condutância leva a mesma forma acima desde que N na equação (2.3) seja identificado com n ou seja:

$$\sigma_{xy} = n \frac{e^2}{h}. \quad (2.7)$$

A quantidade n definida pela equação (2.6) é um invariante topológico, uma vez que ele permanece invariante quando a Hamiltoniana varia suavemente, por exemplo, se algum parâmetro da Hamiltoniana muda, de forma a aumentar ou diminuir o *gap* ou mesmo se pequenas perturbações são introduzidas no sistema. n é também chamado de número de Chern ou invariante de Chern, sendo este nome cunhado pelos matemáticos na teoria de fibrados, uma área da topologia algébrica que possui muitas aplicações nas teorias de calibre das partículas elementares e que vem constantemente sendo aplicada à física da matéria condensada [4, 6].

Para entender um pouco melhor a idéia de invariante topológico considere o exemplo de uma superfície bidimensional. Para qualquer superfície 2D pode-se definir a sua curvatura gaussiana κ , que pode ser positiva, zero ou negativa. Para superfícies fechadas, como a esfera, o toro ou o cubo, a integral da curvatura gaussiana sobre toda a superfície do sólido é um invariante topológico:

$$\int_S \kappa dS = 2\pi(2 - g), \quad (2.8)$$

onde g é o genus da superfície, que vale zero para a esfera e o cubo, um para o toro e coincide com o “número de buracos da superfície”, em qualquer situação. O genus é invariante sob deformações suaves da superfície, sendo que suave aqui quer dizer qualquer deformação que não rasgue a superfície [6].

Os estados metálicos da borda do material surgem de uma correspondência entre o *bulk* e o contorno do material, sendo a topologia não trivial do *bulk* o que força a existência dos estado metálicos no contorno do material. Considere a interface entre um sistema que

está no EHQI com, por exemplo $n = 1$ e o vácuo que possui $n = 0$. Para que o invariante topológico n mude é preciso que o sistema deixe de ser isolante e passe por uma região com estados metálicos sem *gap* de energia, caso contrário n dado pela equação (2.6) não poderia mudar, assim, esse invariante garante a existência de estados metálicos superficiais, pois n muda nessa região. A recíproca também é correta, ou seja, em regiões onde existem estados metálicos o invariante topológico sempre deve mudar. A figura 2.3 abaixo mostra um esquema dessa situação.

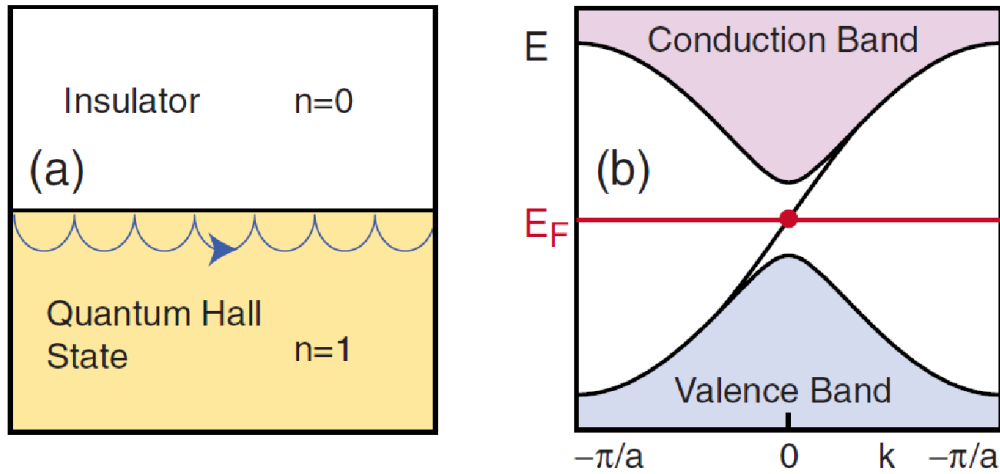


Figura 2.3: Esquerda: estados de borda sem *gap* na interface entre duas fases topologicamente distintas, o efeito Hall com $n = 1$ e o vácuo que possui $n = 0$. Direita: esquema das bandas de energia do sistema mostrando o *gap* dos estados do *bulk* e os estados metálicos sem *gap*. (Fonte: referência [13].)

Vários outros aspectos do efeito Hall inteiro e também fracionário podem ser encontrados na literatura. Algumas referências didáticas sobre esse assunto são [4, 77, 78], outros aspectos mais formais como uma descrição em termos de teorias de campo topológicas e ordens topológicas podem ser encontradas em [79, 80, 81].

2.3 Isolante spin Hall quantizado

O EHQ discutido na seção anterior foi o primeiro exemplo de estado topológico da matéria. Em 2004, um novo estado da matéria, que como o efeito Hall também exhibe

ordem topológica foi descoberto e denominado Estado Hall Quântico de Spin (EHQS) ou simplesmente Isolantes Topológicos bidimensionais. Este novo estado da matéria foi primeiramente predito para ocorrer em poços quânticos de materiais bidimensionais [70, 71, 72]. Posteriormente, em 2006 e 2007 ele foi observado experimentalmente em poços quânticos de $HgTe/CdTe$ [82].

Todos os estados isolantes encontrados na natureza, que preservam a simetria de Reversão Temporal \mathcal{T} e possuem um estado fundamental não degenerado podem ser classificados em duas fases topologicamente distintas. O estado da matéria ISHQ possui uma classificação topológica que distingue-o de um isolante de bandas ordinário. Esta fase é associada a um invariante topológico que possui uma classificação Z_2^1 . Esta classificação Z_2 definida para materiais que possuem sua dinâmica descrita por Hamiltonianas que são invariantes sob Reversão Temporal é análoga à classificação topológica do EHQI [83].

No EHQI a condutividade Hall viola a simetria de Reversão Temporal, assim o invariante TKNN que caracteriza o estado Hall do sistema deve anular-se em sistemas que são invariantes sob \mathcal{T} . Contudo, no capítulo anterior vimos que a interação spin-órbita no grafeno leva a um efeito Hall de spin que é invariante sob \mathcal{T} , possui um *gap* de energia no *bulk* e estados metálicos na borda, que são spin polarizados [66]. Assim, vimos que a interação spin-órbita possibilita a existência de fases topologicamente não triviais que preservam a Reversão Temporal [66]. Para entender melhor este novo estado topológico considere a simetria de Reversão Temporal para sistemas com partículas de spin 1/2. A simetria \mathcal{T} é representada por um operador antiunitário [7, 8] dado por:

$$\Theta = e^{i\pi S_y/\hbar} K, \quad (2.9)$$

onde S_y é o operador de spin e K um operador que toma conjugação complexa. Para elétrons que possuem spin 1/2, Θ possui a propriedade $\Theta^2 = -1$. Isto leva a uma importante restrição no sistema conhecido como Teorema de Krammers [7, 8]. Todos autoestados de uma Hamiltoniana \mathcal{T} invariante são ao menos duplamente degenerados. Isto acontece porque se existisse um autoestado $|\chi\rangle$ não degenerado deveria-se ter $\Theta|\chi\rangle = c|\chi\rangle$, para

¹ Z_2 é o grupo cíclico de dois elementos 0 (par) e 1 (ímpar), o que significa que esta classificação possui duas fases distintas, uma topologicamente trivial (0) e outra não trivial (1).

alguma constante c . Isto significa que $\Theta^2|\chi\rangle = |c|^2|\chi\rangle$, o que não é possível pois $|c|^2 \neq -1$. Assim os autoestados de uma Hamiltoniana \mathcal{T} invariante devem ser ao menos duplamente degenerados com $|\chi\rangle$ e $\Theta|\chi\rangle$ linearmente independentes e com a mesma autoenergia. Na ausência da interação spin-órbita a degenerescência de Krammers é simplesmente a degenerescência entre as componentes *up* e *down* do spin [8], contudo quando há interação spin-órbita ela leva a consequências não triviais. Por exemplo, na estrutura de bandas em um sistema fermiônico que é invariante sob Reversão Temporal os autoestados sempre existem aos pares com degenerescência dupla em alguns pontos da zona de Brillouin [83]

Uma Hamiltoniana de Bloch, invariante sob Reversão Temporal, deve satisfazer

$$\Theta H(\vec{k}) \Theta^{-1} = H(-\vec{k}). \quad (2.10)$$

Pode-se classificar topologicamente todas as Hamiltonianas de Bloch que possuem esta simetria e um *gap* de energia em uma mesma classe topológica, que permite deformações sem que esse se feche. Para esta classe de Hamiltonianas o invariante TKNN é zero, pois a condutividade Hall viola \mathcal{T} , contudo há outro invariante topológico que pode assumir dois possíveis valores $\nu = 0$ ou 1 [84]. A existência de duas classes topológicas pode ser entendida por meio da correspondência entre o interior e o contorno do material.

Na figura 2.4 é mostrado um esquema da estrutura de bandas da borda de um isolante de bandas bidimensional invariante sob \mathcal{T} . Apenas metade da zona de Brillouin é mostrada ($0 < k_x < \pi/a$), pois a invariância temporal impõe que a outra metade ($-\pi/a < k_x < 0$) seja o reflexo desta metade. Note o *gap* de energia entre a banda de condução e de valência no *bulk* do isolante. Nas bordas do material existem duas possibilidades, dependendo dos detalhes da Hamiltoniana podem existir estados com energia no interior do *gap* do *bulk*. Quando existem estados na borda com energia no interior do *gap* eles são duplamente degenerados nos momentos que são invariantes sob \mathcal{T} , $k_x = 0$ e π/a . Estes são valores do momento eletrônico que satisfazem a condição (2.10) pois devido a interação spin-órbita apenas alguns valores discretos de \vec{k} satisfazem esta condição. Estes pontos são designados por Γ_a e Γ_b na figura 2.4 e longe destes pontos a interação-spin órbita quebra a degenerescência de Krammers dos estados eletrônicos [13, 8].

Os estados em $k_x = 0$ e $k_x = \pi/a$ podem se conectar de duas maneiras distintas. Eles

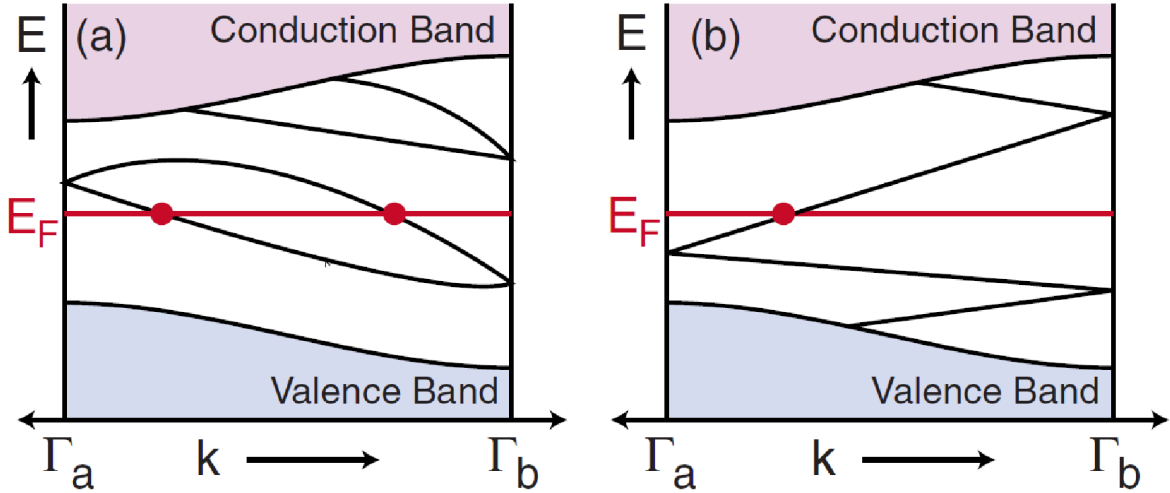


Figura 2.4: Dispersão eletrônica entre dois pontos na borda do Isolante Topológico que possuem degenerescência de Krammers. Em (a) o número de estados da superfície cruzando a E_F entre os pontos $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$ é par e em (b) ímpar. Quando um número ímpar de estados cruza a energia de Fermi existem estados metálicos topologicamente protegidos no contorno do material. (Fonte: referência [13].)

podem se conectar com um número par de estados entre eles, como mostrado na esquerda da figura 2.4. Neste caso estes estados podem ser eliminados por perturbações colocando-os fora do *gap* de energia. Isto ocorre quando a banda de energia cruza a superfície de Fermi um número par de vezes entre os estados $k_x = 0$ e π/a . Por outro lado, se a banda de energia cruza a superfície de Fermi um número ímpar de vezes, como mostrado na direita da figura 2.4, estes estados de borda não podem ser eliminados por perturbações [13].

Qual das alternativas acima ocorre depende da correspondência entre o *bulk* e o contorno do material. Cada banda cruzando a energia de Fermi em k_x possui seu parceiro degenerado de Krammers em $-k_x$, a correspondência *bulk*-contorno relaciona o número de parceiros de Krammers que cruza a E_F da borda do material N_K , com a mudança do invariante Z_2 através da interface [13]:

$$N_K = \Delta\nu \bmod 2. \quad (2.11)$$

Se o isolante possui N_K par ($\nu = 0$), se encontra em uma fase topologicamente trivial e se N_K for ímpar ($\nu = 1$), está no EHQS, que é um estado topologicamente não trivial e possui estados de borda topologicamente protegidos como aqueles do EHQL.

Em isolantes a reorganização de átomos na superfície, ou a modificação de ligações químicas pode introduzir estados superficiais que possuem sua energia no *gap* da banda, mas são restritos a se moverem em torno da superfície bidimensional. Estes estados geralmente são frágeis e sua existência depende dos detalhes da geometria e da química da superfície [5]. Em contraste a isto em um IT os estados de superfície são protegidos, isto é, sua existência não depende em como a superfície do material é organizada, não depende da sua geometria e a explicação para isto é matemática e se baseia no fato que a Hamiltoniana descrevendo os estados da superfície é invariante sob pequenas perturbações [5].

Existem várias formulações matemáticas do invariante topológico ν [84, 83, 16, 85, 86]. Uma interessante [84], que pode ser generalizada para três dimensões e que têm sido útil para identificar IT a partir da estrutura de bandas é baseado na matriz $w_{mn}(\vec{k}) = \langle u_m(\vec{k}) | \Theta | u_n(-\vec{k}) \rangle$ construída a partir das funções de Bloch dos estados ocupados $|u_m(\vec{k})\rangle$. Desde que Θ é antiunitário e $\Theta^2 = -1$ têm-se $w^T(\vec{k}) = -w(-\vec{k})$. Em um isolante existem quatro pontos especiais Λ_a na zona de Brillouin do *bulk* onde \vec{k} e $-\vec{k}$ coincidem e nesse caso $w(\Lambda_a)$ é antissimétrica. O determinante de uma matriz antissimétrica é o quadrado de seu Pfaffian, que permite definir a quantidade:

$$\delta_a = \frac{\text{Pf}[w(\Lambda_a)]}{\sqrt{\text{Det}[w(\Lambda_a)]}} = \pm 1. \quad (2.12)$$

O Z_2 invariante ν é então definido como:

$$(-1)^\nu = \prod_{a=1}^4 \delta_a. \quad (2.13)$$

Esta expressão pode ser generalizada para IT tridimensionais onde existem oito pontos especiais na zona de Brillouin. Quando o cristal possui alguma simetria extra, o cálculo de ν se torna mais simples, por exemplo, quando a componente S_z do spin é conservada $[H, S_z] = 0$, o cálculo se torna mais simples, pois existe um EHQS para cada componente do spin [66]. Quando o cristal possui além de Reversão Temporal, simetria de Inversão Espacial, nos pontos especiais Λ_a os autoestados de Bloch $|u_m(\Lambda_a)\rangle$ são também autoestados da Paridade (\mathcal{P}) com autovalores $\xi_m(\Lambda_a) = \pm 1$. O invariante Z_2 é obtido de (2.13) com:

$$\delta_a = \prod_m \xi_m(\Lambda_a), \quad (2.14)$$

sendo o produto feito sobre todos os pares de Krammers das bandas ocupadas.

O EHQS pode ser visualizado como duas cópias do EHQI, onde estados com spin opostos contra-propagam na borda do material. Como no EHQI em regiões onde o invariante ν muda, como na interface entre o EHQS e o vácuo existem estados metálicos condutores (figura 2.5). Tais estados, chamados de helicais [87], em analogia com a

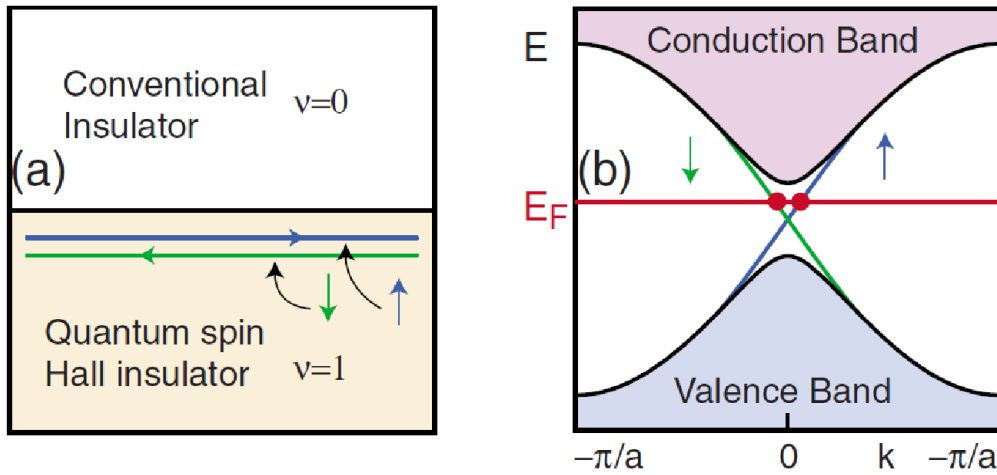


Figura 2.5: Estados de borda no EHQS. À esquerda interface entre um EHQS que possui $\nu = 1$ e o vácuo, $\nu = 0$. Existem estados de borda metálicos que são spin polarizados, isto é, partículas com diferentes componentes *up* e *down* do spin propagam em sentidos opostos sendo os dois “canais” de propagação conectados pela simetria de Reversão Temporal. À direita um esquema da estrutura de bandas onde o *gap* do bulk do material e os estados metálicos da borda spin polarizados são mostrados. (Fonte: referência [13].)

correlação entre spin e momento de partículas com massa nula chamada de helicidade [2], e formam um condutor unidimensional que é essencialmente metade de um condutor ordinário. Condutores ordinários possuem elétrons com spin *up* e *down* propagando em ambas as direções e são frágeis, pois os estados são susceptíveis a localização de Anderson mesmo na presença de desordem fraca. Em contraste a isto no EHQS os estados de borda não podem ser localizados nem na presença de desordem forte devido à simetria de Reversão Temporal do sistema (desde que a impureza seja não magnética) [84, 13].

Para entender isto considere uma impureza não magnética na borda do EHQS. Esta

impureza pode causar espalhamento dos portadores em sentido contrário à propagação inicial, contudo, considere um portador com spin *up*. Para ser espalhado em sentido oposto a sua propagação ele pode contornar a impureza de duas formas distintas e como apenas spin *down* pode propagar no sentido oposto, seu spin tem que rodar adiabaticamente de π ou $-\pi$ em cada um dos casos, como mostrado na figura 2.6. Conseqüentemente, os dois caminhos para o espalhamento diferem por uma rotação do spin dos elétrons de $\pi - (-\pi) = 2\pi$. A função de onda de férmions com spin 1/2 como elétrons ganha um sinal negativo sempre que o spin é rodado por 2π [7, 8] o que leva a uma completa interferência destrutiva entre os dois caminhos espalhados. Se a impureza possui um momento magnético, \mathcal{T} é violada e as duas ondas refletidas não interferem destrutivamente. Neste sentido a robusteza dos estados de borda é protegida pela simetria de Reversão Temporal [9, 14].

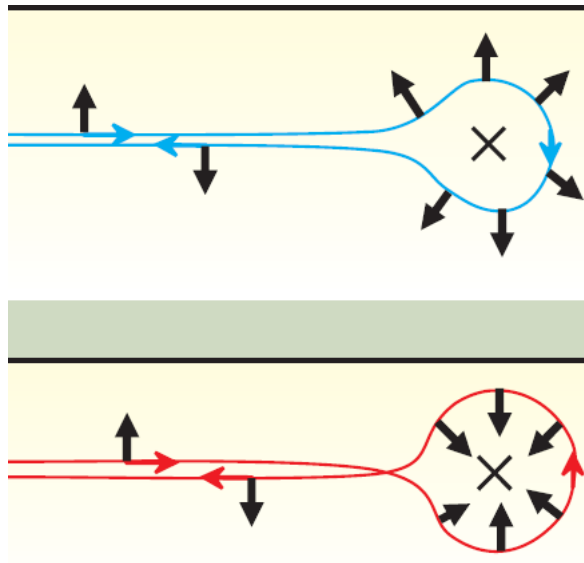


Figura 2.6: Espalhamento dos portadores na borda do EHQS. O espalhamento pode ocorrer de duas formas distintas fazendo o spin dos portadores girar no sentido horário de $-\pi$ ou no sentido antihorário de π . Os dois caminhos diferem por uma rotação do spin dos elétrons de 2π e interferem destrutivamente. (Fonte: referência [9].)

A primeira proposta teórica de IT bidimensional foi filmes ultrafinos de Bismuto [88], devido ao forte acoplamento spin-órbita neste material. Posteriormente foi proposto

que poços quânticos de $HgTe$ comprimidos entre $CdTe$ deveria ser um IT desde que a camada de $HgTe$ fosse superior a um valor crítico de $d_c \sim 6.5\text{nm}$ [70]. Esta última proposta teórica foi verificada experimentalmente e constitui o primeiro exemplo de IT bidimensional [82, 12].

A essência do EHQS em materiais reais pode ser obtida de modelos explícitos que são particularmente simples para se resolver [12, 14, 89]. O IT bidimensional $HgTe/CdTe$ pode ser descrito por uma Hamiltoniana efetiva que é essencialmente uma expansão em série de Taylor no vetor de onda \vec{k} das interações entre a banda de condução com menor energia e a banda de valência com maior energia. Explicitamente este modelo é dado por [12, 14, 89]:

$$H(\vec{k}) = \epsilon(k)\mathbf{1}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} M(k) & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -M(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(k) & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -M(k) \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

sendo $\epsilon(k) = C + D(k_x^2 + k_y^2)$ e $M(k) = M - B(k_x^2 + k_y^2)$ e os parâmetros A , B , C , D e M dependem da geometria do poço quântico. O zero da energia neste modelo é localizado na borda da banda de valência em $\vec{k} = 0$. Este modelo é conhecido como modelo BHZ (Bernevig, Hughes e Zhang). O espectro de energia do *bulk* é dado por:

$$E_{\pm} = \epsilon(k) \pm \sqrt{A^2(k_x^2 + k_y^2) + M^2(k)}. \quad (2.16)$$

O *gap* entre as bandas é dado por $2M$ e o sinal $+$ ($-$) está associado com a banda de condução (valência). Para $M/B < 0$ os autoestados deste modelo descrevem um isolante trivial, (B é tipicamente negativo) e mudando a geometria do poço M torna-se negativo e as soluções do modelo BHZ descrevem um EHQS com estados de borda metálicos e um *bulk* isolante [9, 12, 14].

Um modelo efetivo para os estados de borda pode ser obtido do modelo BHZ projetando-se a Hamiltoniana efetiva do *bulk* (2.15) nos estados de borda ψ_{\uparrow} e ψ_{\downarrow} que são spin polarizados. Considerando a interface entre o EHQS e o vácuo como sendo o eixo y (IT localizado na região $x > 0$) a Hamiltoniana efetiva que descreve os estados de borda

helicais é:

$$H_{\text{borda}} = Ak_y \sigma^z. \quad (2.17)$$

Para poços quânticos de $HgTe$ $A \simeq 3.6 \text{ eV} \cdot \text{Å}$ [12] e a velocidade de Dirac dos estados de borda é dada por $v = A/\hbar \simeq 5.5 \times 10^5 \text{ m/s}$. Outros aspectos dos IT bidimensionais podem ser encontrados nos excelentes artigos de revisão [13, 12, 14].

2.4 Isolantes Topológicos em 3D

O estado da matéria topologicamente não-trivial discutido na seção anterior pode ser generalizado para 3 dimensões [90]. Os IT tridimensionais foram preditos teoricamente para ocorrer em vários materiais reais. O primeiro deles foi a liga $Bi_{1-x}Sb_x$, predita para ser um IT para $0.07 < x < 0.22$ [91]. Posteriormente um grupo da universidade de Princeton, liderado por Zahid Hasan fez a verificação experimental de que esta liga é de fato um IT utilizando uma técnica chamada de ARPES (*angle resolved photoemission spectroscopy*) [92, 93]. A segunda geração de IT 3D foi predita teoricamente na referência [94], onde utilizando-se cálculos *ab initio* os compostos Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 foram preditos para serem IT. Esta segunda geração possui uma estrutura topológica mais simples que a liga $Bi_{1-x}Sb_x$ e exibe suas propriedades topológicas mesmo em temperatura ambiente, no caso do Bi_2Se_3 [13, 14]. Ela é composta de compostos estequiométricos que possibilitam um grande desenvolvimento experimental, pois um composto estequiométrico, diferentemente de uma liga, permite a obtenção de amostras com alto grau de pureza. Observe que todos estes compostos que exibem uma estrutura topológica não-trivial possuem em sua composição elementos químicos pesados que exibem um forte acoplamento spin-órbita.

A observação experimental da segunda geração do IT foi feita em 2009 [95, 13]. Estes materiais exibiram a potencialidade de apresentar seu comportamento topológico mesmo em temperatura ambiente, pois possuem um *gap* de energia no *bulk* grande. Por exemplo, o Bi_2Se_3 possui um *gap* de $\sim 0.3 \text{ eV}$ (3600 K) o que potencializa este material para futuras aplicações [13]. Esta nova geração possui uma estrutura de estados superficiais com apenas um cone de Dirac mais simples que aquela do $Bi_{1-x}Sb_x$ que apresenta cinco [13].

Os IT bidimensionais e tridimensionais preservam a simetria de Reversão Temporal e conseqüentemente o invariante TKNN para estes materiais é zero. No caso dos bidimensionais vimos que existe um invariante ν que pode assumir dois valores que distingue os isolantes triviais dos IT. No caso dos IT tridimensionais existe um conjunto de quatro invariantes topológicos Z_2 que podem ser utilizados para classificar o material $(\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3)$ [90, 83, 96]. Estes invariantes topológicos são calculados a partir das propriedades topológicas da estrutura de bandas do *bulk* do material. Cada um deles pode assumir um valor par ($mod 2 = 0$) ou ímpar ($mod 2 = 1$), sendo por isso, chamada de simetria Z_2 (grupo discreto de 2 elementos, 0 e 1). Assim em três dimensões existem dezesseis fases topologicamente distintas de isolantes, porém dos quatro invariantes topológicos apenas ν_0 é robusto na presença de desordem, o que leva a apenas duas fases topológicas distintas, possíveis de serem observadas, a $\nu_0 = 0$ que corresponde a um isolante ordinário, também chamada de Isolante Topológico fraco e a $\nu_0 = 1$ chamada de Isolante Topológico forte ou apenas Isolante Topológico.

Os invariantes topológicos $(\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3)$ podem ser entendidos com base na correspondência *bulk*-contorno como no caso bidimensional. Os estados superficiais de um cristal tridimensional podem ser descritos por um momento eletrônico \vec{k} , que assume valores em um plano. Há quatro pontos denotados por $\Gamma_{1,2,3,4}$ na zona de Brillouin da superfície de um material que são invariantes sob Reversão Temporal e devido ao teorema de Kramers os estados eletrônicos nestes pontos devem ser pelo menos duplamente degenerados. Longe destes pontos a interação spin-órbita quebra a degenerescência (veja a figura 2.7). Estes pontos especiais degenerados são pontos onde a banda de condução toca a banda de valência, como ocorre no grafeno, e são chamados de pontos de Dirac, devido ao fato da dispersão dos estados eletrônicos próximos a estes pontos ser linear. A superfície de Fermi do material pode cercar um número par ou ímpar destes pontos em seu interior. Quando um número par destes pontos é cercado, o material possui $\nu_0 = 0$ e é um isolante trivial. Mas quando o número desses pontos é ímpar, o material possui $\nu_0 = 1$, e exibe uma fase topológica não-trivial. Os dois casos são ilustrados na figura 2.7, onde também é mostrado um ponto de Dirac.

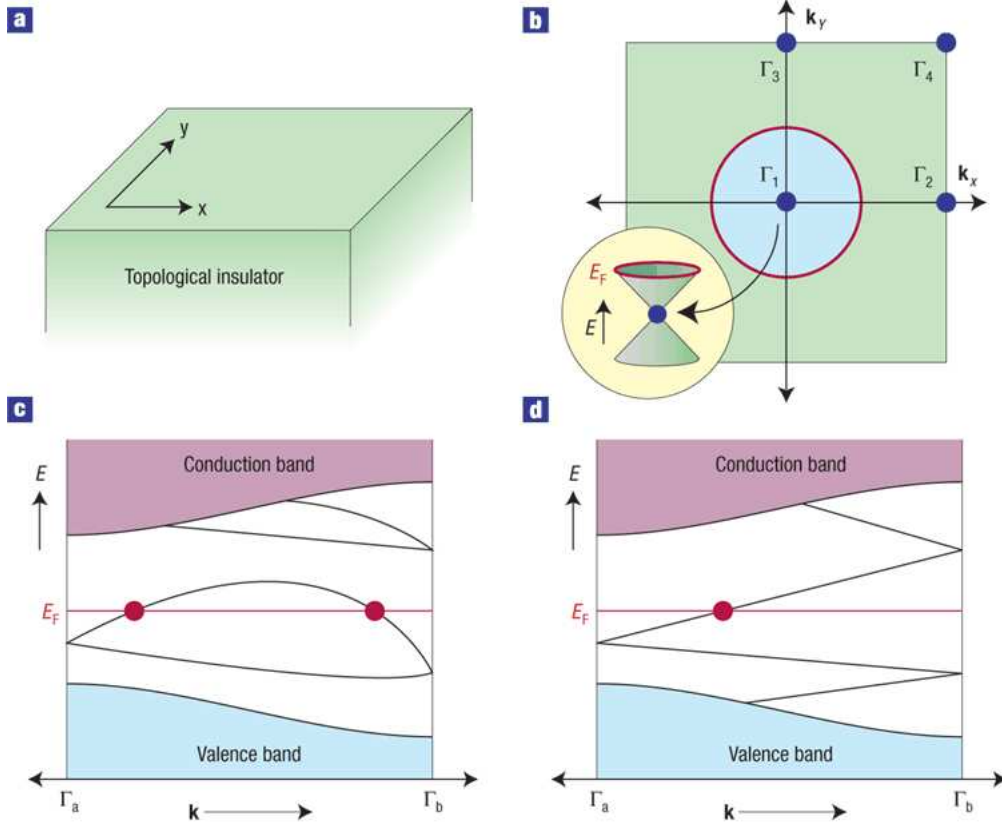


Figura 2.7: Em (a) é mostrada a superfície de um IT no espaço real e em (b) no espaço recíproco onde os quatro pontos Γ_{1234} , que possuem degenerência de Kramers, são mostrados. Note que em (b) a superfície de Fermi engloba apenas um desses pontos e o respectivo cone de Dirac também é mostrado. Em (c) e (d) são mostrados a estrutura de bandas entre dois pontos que apresentam degenerência de Kramers; em (c) um isolante trivial e em (d) um isolante topológico. (Fonte: referência [97].)

Uma formulação matemática simples para os invariantes topológicos tridimensionais surge como uma generalização daquela apresentada na seção anterior para os bidimensionais [90]. Em um cristal tridimensional existem oito pontos com momento cristalino Λ_a na zona de Brillouin do *bulk* que são invariantes sob Reversão Temporal. O invariante ν_0 é definido como uma generalização de (2.13) [90, 14]:

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{a=1}^8 \delta_a, \quad (2.18)$$

onde os δ_a são definidos pela equação (2.12). Quando o cristal possui simetria de Inversão Espacial ou Paridade existe outra expressão que simplifica o cálculo, que é uma genera-

lização de (2.19)[90, 14]:

$$\delta_a = \prod_m \xi_m(\Lambda_a). \quad (2.19)$$

Como em 2D o produto aqui é feito sobre todos os pontos das bandas ocupadas que possuem degenerescência de Kramers [90, 14]. Existem outras formulações matemáticas destes invariantes [14], mas esta brevemente discutida aqui têm se mostrado a mais eficiente para procurar por materiais que exibem fases topologicamente não triviais.

Utilizando-se as simetrias dos cristais que são IT, como Bi_2Se_3 , é possível construir hamiltonianas efetivas, válidas em longos comprimentos de onda (ou baixas energias) que descrevem estes materiais. Cálculos *ab initio*, então, podem ser utilizados para ajustar os parâmetros destes modelos efetivos que fornecem uma boa descrição analítica [89, 14]. Todos os três isolantes topológicos da segunda geração podem ser descritos por uma mesma Hamiltoniana efetiva, que mantendo apenas termos lineares e quadráticos no momento eletrônico \vec{k} é dada por [94, 89, 14, 9]:

$$H(\vec{k}) = \epsilon(k)\mathbf{1}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} M(k) & A_1 k_z & 0 & A_2(k_x - ik_y) \\ A_1 k_z & -M(k) & A_2(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & A_2(k_x + ik_y) & M(k) & -A_1 k_z \\ A_2(k_x + ik_y) & 0 & -A_1 k_z & -M(k) \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

sendo $\epsilon(k) = C + D_1 k_z^2 + D_2 k_\perp^2$ e $M(k) = M - B_1 k_z^2 - B_2 k_\perp^2$. Os parâmetros $A_1, A_2, B_1, B_2, C, D_1, D_2$ e M , dependem dos detalhes do material e podem ser obtidos ajustando-se o espectro desta teoria efetiva com dados obtidos de cálculos *ab initio* [14, 94]. Esta teoria efetiva descreve todas as propriedades topológicas dos IT tridimensionais em baixas energias.

Uma importante consequência da topologia não-trivial dos IT é a existência de estados topológicos na superfície do IT. Estados estes que são protegidos pela topologia do sistema e sempre surgem em regiões onde o invariante topológico ν_0 muda, como na interface entre um IT e o vácuo. A existência de estados superficiais topológicos é uma das mais importantes propriedades dos isolantes topológicos podendo ser obtidos diretamente, a partir de cálculos *ab initio*, ou projetando-se a Hamiltoniana do *bulk* na superfície do material. Ambos os métodos levam ao mesmo resultado. No caso dos IT descritos pela

Hamiltoniana efetiva (2.20), considerando a superfície do IT no plano $x - y$ e o *bulk* na região $z < 0$, os estados superficiais são descritos pela seguinte Hamiltoniana (considerando apenas termos lineares no momento eletrônico \vec{k}) [94, 14]:

$$H_{\text{sup.}} = A_2(\sigma^x k_x + \sigma^y k_y). \quad (2.21)$$

Para $A_2 = 4.1 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$, que é típico para Bi_2Se_3 , a velocidade de Fermi dos estados superficiais é dada por $v_F = A_2/\hbar \simeq 6.2 \times 10^5 \text{ m/s}$ [94]. A teoria efetiva (2.21) é válida no caso mais simples, em que o isolante topológico possui um único ponto de Dirac na superfície. Esta teoria efetiva dos estados superficiais será o ponto de partida para algumas análises dos resultados apresentados nos capítulos 4 e 5 [49]. No espaço físico (2.21) é dada por:

$$H_{\text{sup}} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}, \quad (2.22)$$

com as matrizes de Pauli $\vec{\sigma}$ caracterizando o spin real dos estados superficiais. Note que a relação de dispersão dos estados superficiais nos isolantes topológicos tridimensionais assemelha-se à do grafeno. Porém, no grafeno existem quatro tipos de férmions, devido à degenerescência de spin e vale [23], enquanto em isolantes topológicos há apenas um tipo, que pode polarizar nas duas componentes do seu spin. A descrição efetiva dos estados eletrônicos superficiais no IT é feita por meio de uma Hamiltoniana de Dirac em 2+1 dimensões sem um termo de massa. No apêndice A são apresentados alguns detalhes da teoria de Dirac do elétron em 2+1 dimensões.

Para entender as propriedades físicas destes estados superficiais pode-se analisar a forma dos operadores de spin neste sistema [89, 14]. Quando projetados nos estados superficiais os operadores de spin para a hamiltoniana (2.20) possuem matrizes de elementos entre estados dadas por: $\langle \psi | S_x | \psi \rangle = S_{x0} \sigma_x$, $\langle \psi | S_y | \psi \rangle = S_{y0} \sigma_y$ e $\langle \psi | S_z | \psi \rangle = S_{z0} \sigma_z$ com S_{x0} , S_{y0} , S_{z0} constantes. Estas relações demonstram que as matrizes de Pauli aparecendo em (2.22) são de fato proporcionais ao spin físico das partículas na superfície do IT [89, 14]. Os estados superficiais dos IT tridimensionais descritos pela equação (2.22) possuem um espectro linear e exibem uma textura helical de spin que possui direções opostas na banda de valência e de condução como mostrado na figura 2.8.

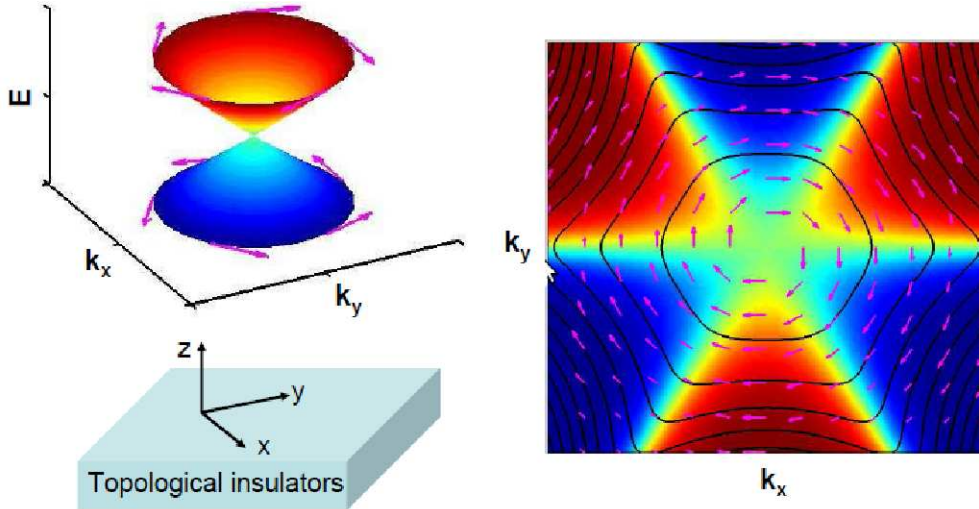


Figura 2.8: Textura helical de spin dos estados superficiais próximos ao centro da zona de Brillouin de um IT tridimensional. Esquerda: A helicidade dos estados na banda de condução é contrária àquela dos estados da banda de valência. Direita: Visão superior da textura de spin. O spin dos portadores é contido na superfície do IT e correlacionado com seu momento \vec{k} , sendo sempre perpendicular a ele e estados com momentos opostos \vec{k} e $-\vec{k}$ possuem spins opostos, devido à simetria de Reversão Temporal. (Fonte: referência [89].)

Estes estados superficiais possuem muitas propriedades interessantes. Por exemplo, um *gap* não pode ser aberto por impurezas não-magnéticas, isto é, por aquelas que não conduzam à violação da simetria de Reversão Temporal, \mathcal{T} , já que o Teorema de Kramers garante a existência dos pontos de Dirac. Por outro lado, impurezas magnéticas, que quebram \mathcal{T} , podem abrir um *gap* nos estados superficiais do material [47]. Esses estados suportam um movimento eletrônico em qualquer direção ao longo da superfície do IT tridimensional. O spin dos elétrons confinados à superfície do material é correlacionado com seu momento eletrônico de tal forma que o seu momento angular de spin é sempre perpendicular a \vec{k} e fica contido na superfície do IT. A reversão temporal obriga estados com vetores de onda opostos \vec{k} e $-\vec{k}$ terem orientações de spin opostas [13, 14].

É interessante notar que diversas propriedades dos IT manifestam-se mais explicitamente quando a simetria de Reversão Temporal é preservada no interior do material (*bulk*), mas quebrada na sua superfície. Quando isto ocorre os estados superficiais podem adquirir um *gap* de energia e o material torna-se completamente isolante, no interior e na

superfície. Isto pode ser feito pela aplicação de um campo magnético externo ou por efeito de proximidade do IT a um material magnético, por exemplo, cobrindo a superfície do IT com um filme magnético ordenado. Estes efeitos são descritos pela resposta eletromagnética dos IT a campos externos [13, 14, 15].

2.5 Resposta Eletromagnética dos IT

Assim como ocorre no efeito Hall, a estrutura topológica dos IT deve levar a coeficientes de resposta eletromagnética quantizados. Esta resposta de um IT tridimensional é chamada de efeito magnetoelétrico topológico [16, 17, 14, 98], que ocorre quando a simetria de Reversão Temporal é quebrada na superfície, mas preservada no *bulk*. A origem física por traz deste efeito é a corrente Hall que existe na superfície do IT quando a simetria \mathcal{T} é quebrada. Vamos analisar este efeito.

A única perturbação independente do momento eletrônico \vec{k} que pode ser adicionada na Hamiltoniana que descreve os estados superficiais dos IT (2.22) é um termo de massa proporcional a σ^z [14]. O termo de massa $m\sigma^z$ é ímpar sob Reversão Temporal (detalhes sobre isto podem ser encontrados no apêndice A), o que é esperado da estabilidade topológica dos estados de superfície que possuem massa nula e são protegidos pela simetria \mathcal{T} [14, 16]. Sempre que existe um *gap* nos estados superficiais do IT, este é introduzido na equação de Dirac por meio de um termo de massa, e ela fica na forma:

$$H_{\text{sup}} = v_F(\sigma^x k_x + \sigma^y k_y) + m\sigma^z. \quad (2.23)$$

Um termo de massa na equação de Dirac viola também a Inversão Espacial ou Paridade e isto induz importantes consequências físicas. Para ver a consequência desta violação de Paridade basta acoplar a equação de Dirac a um campo eletromagnético externo e obter, por exemplo, por meio do cálculo da ação efetiva do sistema, a resposta eletromagnética que este apresenta [99]. Quando se faz um cálculo como este obtêm-se que um dos termos presente na ação efetiva é um termo de Chern-Simons da forma [99]:

$$S_{ef}[A] = -\frac{1}{8\pi} \text{sgn}(m) \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\alpha} A_\mu \partial_\nu A_\alpha + f(A, \partial, m), \quad (2.24)$$

sendo que $f(A, \partial, m)$ representa a contribuição para $S_{ef}[A]$ dos termos que não violam a simetria de Paridade. A corrente eletrônica gerada no sistema pelo campo eletromagnético externo representando pelo potencial vetor A^μ é dada pela derivada funcional da ação efetiva em relação ao campo A^μ [99, 16]:

$$j^\mu = \frac{\delta S_{ef}[A]}{\delta A_\mu} = \frac{1}{4\pi} \text{sgn}(m) \epsilon^{\mu\nu\alpha} \partial_\nu A_\alpha. \quad (2.25)$$

Por exemplo, considere a componente x desta corrente,

$$\begin{aligned} j^x &= \frac{1}{4\pi} \text{sgn}(m) (\partial_0 A_y - \partial_y A_0), \\ j^x &= \frac{1}{4\pi} \text{sgn}(m) E_y. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Isto mostra que o sistema possui uma condutividade Hall dada por:

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{4\pi} \text{sgn}(m) = -\frac{e^2}{2h} \text{sgn}(m) \quad (2.27)$$

onde na última passagem as constantes h e e foram restauradas. A função $\text{sgn}(m) = \frac{m}{|m|}$ assume os valores ± 1 . Observe que a condutância Hall (2.27) para férmions de Dirac em (2+1) dimensões é igual a metade do *quantum* de condutância. É importante notar que mesmo no caso para férmions com massa nula, onde a simetria de Paridade é preservada, na presença de um campo eletromagnético externo a corrente Hall não é zero [99]. Pode-se mostrar também que o fato da condutividade Hall para férmions não ser nula é devido a uma estrutura topológica não trivial no espectro de energia. Mais detalhes podem ser encontrados nas referências [99, 16, 14]. A condutância Hall pode ser escrita na forma:

$$\sigma_{xy} = \frac{m}{|m|} \frac{e^2}{2h}, \quad (2.28)$$

de onde pode se ver que ela permanece finita mesmo no limite $m \rightarrow 0$. Assim a violação da simetria de Reversão Temporal (ou Paridade) na superfície dos IT traz consequências físicas surpreendentes [99, 16, 14].

Quando existe um campo magnético perpendicular à superfície a quantização das órbitas eletrônicas leva a níveis de Landau e a um EHQ com condutividade Hall como a discutida anteriormente. Os níveis de Landau para elétrons de Dirac são especiais porque

sempre existe um nível que possui energia nula [100], além de uma simetria de partícula-buraco, de modo que, a condutividade Hall é igual e oposta quando o nível está completamente cheio ou vazio. Como a condutividade Hall muda por e^2/h quando a energia de Fermi cruza um nível de Landau a condutividade Hall na superfície do isolante topológico possui quantização semi-inteira:

$$\sigma_{xy} = (n + 1/2) \frac{e^2}{h}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.29)$$

Este tipo de fenômeno ocorre também no grafeno, porém, lá a condutividade deve ser multiplicada por 4 devido à degenerescência entre spin e vale de tal forma que a condutividade observada ainda possui uma quantização inteira [23] como discutido na seção 1.2.

Uma maneira prática de se quebrar a simetria de Reversão Temporal na superfície e preservá-la no *bulk* é cobrindo a superfície do IT com um filme magnético fino. Neste caso a degenerescência de Kramers é rompida pela interação de troca entre os momentos magnéticos do filme e dos elétrons da superfície. No caso mais simples esta interação pode ser escrita na forma [44, 14]:

$$H_{int} = \sum_i J_i \vec{S}_i \cdot \psi^\dagger \vec{\sigma} \psi, \quad (2.30)$$

sendo \vec{S}_i o spin da impureza (ou substância) magnética que constitui o filme, $\psi^\dagger \vec{\sigma} \psi$ a densidade de spins dos elétrons da superfície do IT e J_i o acoplamento de troca. Este acoplamento gera um *gap* de energia no cone de Dirac, (figura 2.9) e pode ser descrito pela introdução de uma massa na equação de Dirac (2.22) como em (2.23) (veja a figura 2.9). Se a energia de Fermi encontra-se neste *gap* existe uma condutividade Hall semi-inteira quantizada, $\sigma_{xy} = e^2/2h$, como ocorre na presença de um campo magnético externo.

Existe uma importante diferença entre o EHQI e aquele com quantização semi-inteira que ocorre na superfície de um IT que possui um *gap* magnético. A principal diferença é que o último não pode ser medido por um experimento de transporte com corrente contínua como no caso do EHQI [14]. Isto ocorre porque no EHQI existem estados de borda quirais que transportam a corrente e podem ser medidos. Já a superfície de um IT 3D é sempre um *manifold* fechado, sem bordas e se toda a superfície possui um *gap* produzido por impurezas magnéticas não existem estados de borda para transportar uma

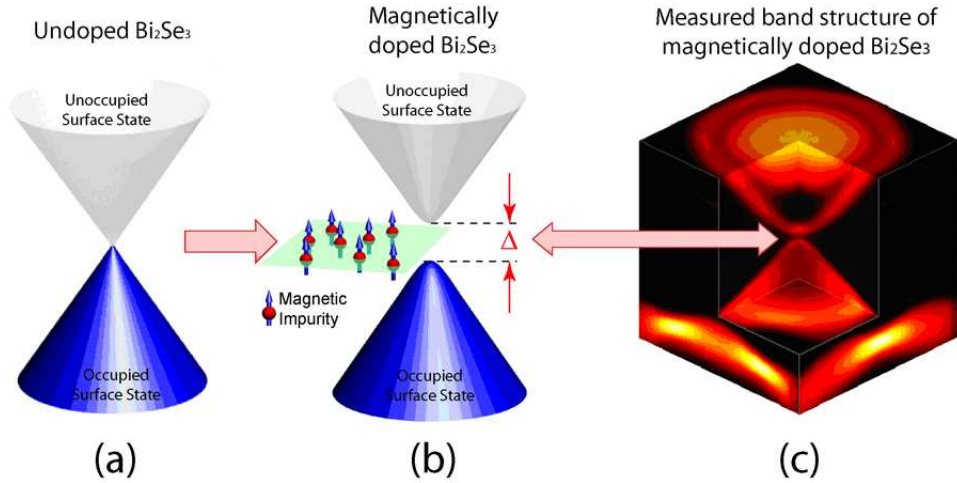


Figura 2.9: Ilustração do cone de Dirac sem *gap* em Bi_2Se_3 . Um *gap* abre devido a presença de impurezas magnéticas, fazendo com que os férmions de Dirac na superfície se tornem massivos. À direita a estrutura de bandas de Bi_2Se_3 dopado com impurezas magnéticas observada utilizando ARPES onde pode se ver o *gap*. (Fonte: referência [101, 102].)

corrente [14]. Por outro lado quando existe uma parede de domínio magnético na superfície do IT 3D a condutância Hall dá um salto devido a (2.28), pois em diferentes lados da parede a massa m é diferente [14]. A variação da condutância Hall neste caso é e^2/h e existem estados quirais propagando-se ao longo da parede que podem ser medidos em experimentos de transporte, figura 2.10.

A diferença entre o EHQI e o com quantização semi-inteira na superfície do IT indica que este é um efeito topológico que quando detectado testa a resposta eletromagnética do *bulk* dos IT 3D [98, 16], resposta esta chamada de efeito magnetoeétrico topológico. Resumidamente, este efeito consiste na magnetização do material quando um campo elétrico é aplicado e de uma polarização quando um campo magnético é aplicado. Este efeito ocorre justamente devido ao fato de existir uma corrente Hall na superfície do material [98, 16, 14, 13, 17]. Para ver a relação deste efeito com a corrente Hall na superfície considere a geometria mostrada na figura 2.11, onde a lateral do IT cilíndrico é coberta por uma impureza magnética com ordem ferromagnética de tal forma que, os estados da superfície possuem um *gap* e exibem o efeito Hall com quantização semi-inteira. Quando um campo elétrico é aplicado paralelo à superfície do IT uma corrente Hall circula ao longo

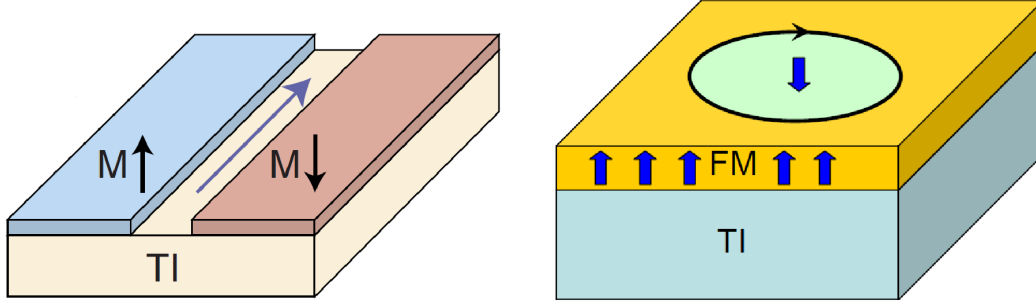


Figura 2.10: Duas situações distintas onde existe uma parede de domínio magnético na superfície de um IT. Esquerda: a magnetização ferromagnética possui orientações distintas em duas regiões da superfície do IT. Direita: a região central do IT possui magnetização oposta ao restante criando uma parede de domínio circular fechada. Nos dois casos estados quirais circulam ao longo da região da parede de domínio. (Fonte: referência [16, 14].)

da superfície dada por [16, 14, 17]:

$$\vec{j} = \frac{m}{|m|} \frac{e^2}{2h} \hat{n} \times \vec{E}, \quad (2.31)$$

\hat{n} é um vetor normal a superfície e o sinal do termo de massa, $m/|m|$, é determinado pelo sentido da magnetização na superfície do material. Essa corrente superficial é perpendicular ao campo elétrico e deverá induzir um campo magnético paralelo a \vec{E} .

Esta resposta é equivalente a uma magnetização proporcional ao campo elétrico [16, 14, 13]:

$$\vec{M} = -\frac{m}{|m|} \frac{e^2}{2h} \vec{E}. \quad (2.32)$$

Esta magnetização é uma resposta topológica ao campo elétrico aplicado. De forma análoga, um campo magnético externo polariza o material gerando, uma polarização \vec{P} , de origem topológica. Quando um campo magnético externo é aplicado paralelamente ao eixo do cilindro (figura 2.11) ele deve iniciar com o valor zero até o final. Assim pela lei de Faraday um campo elétrico é induzido na superfície do cilindro circulando em torno do eixo. Este campo induz uma corrente Hall paralela (ou antiparalela) ao eixo do cilindro proporcional a dB/dt . Consequentemente uma densidade de carga proporcional ao campo \vec{B} externo é acumulada no topo e na base do cilindro criando uma polarização de origem

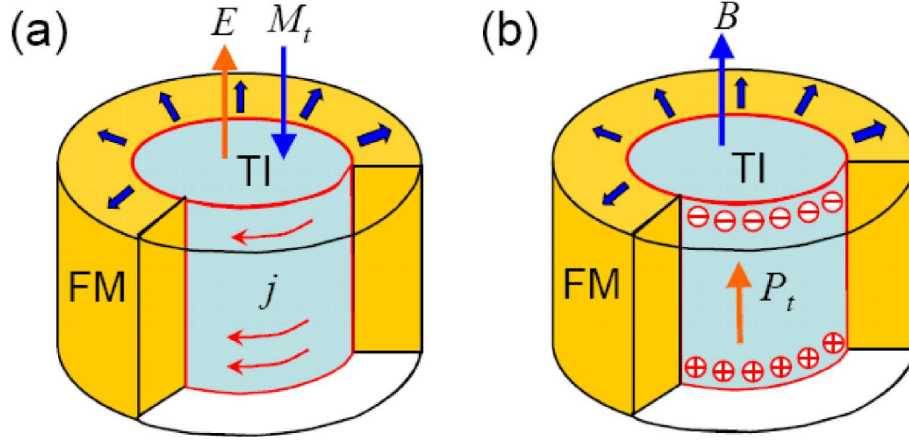


Figura 2.11: Ilustração da magnetização induzida por um campo elétrico em uma geometria cilíndrica. A magnetização aponta para fora da superfície do IT e uma corrente que circula ao longo da superfície é induzida pelo campo elétrico. A direita ilustração da carga de polarização induzida por um campo magnético que produz uma polarização do IT paralela ao campo magnético. (Fonte: referência [16].)

topológica dada por [16]:

$$\vec{P} = \frac{m}{|m|} \frac{e^2}{2h} \vec{B}. \quad (2.33)$$

Note que a resposta eletromagnética topológica é quantizada em múltiplos inteiros da constante de estrutura fina $\alpha = e^2/\hbar c$. A resposta eletromagnética completa do IT é dada pelas equações de Maxwell em meios materiais com relações constitutivas que incluem as contribuições topológicas para \vec{E} e \vec{B} discutidas acima [16, 14]:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} - 2\alpha P_3 \epsilon_0 c \vec{B}, \quad (2.34)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} + 2\alpha P_3 \epsilon_0 c \vec{E}, \quad (2.35)$$

com $P_3 = m/2|m| = \pm 1/2$. Embora descritas aqui para o caso de uma geometria cilíndrica as relações (2.31), (2.32) e (2.33) são válidas para uma geometria arbitrária qualquer [16]. A única generalização necessária é trocar o termo $m/2|m|$ por $n + 1/2$, com n um inteiro [16, 14, 17].

Uma teoria de campos topológica pode ser formulada para descrever o efeito magnetoeletrico topológico [16, 14, 17, 98, 13]. Esta teoria inclui um termo θ topológico na lagrangeana do campo eletromagnético que possui a mesma forma que o termo que descreve

o axion em física de partículas [103]:

$$\mathcal{L}_\theta = \frac{\theta\alpha}{4\pi^2} \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (2.36)$$

Uma descrição desta teoria de campos para os IT é apresentada no apêndice B. Interessante notar que a teoria de campos topológica descreve de forma unificada o sistema mesmo na presença de interações e desordem, o que não é muito simples na descrição por meio de teoria de bandas e que ela é válida apenas no limite de baixas energias (longos comprimentos de onda) sendo uma teoria efetiva [16, 14, 17, 98, 13, 9].

Uma das consequências mais diretas do efeito magnetoelétrico topológico é a indução de um par carga-monopolo magnético, chamado de *dyon* como carga imagem, devido a presença de uma carga elétrica próxima a superfície do IT [17]. Isto ocorre porque devido a presença do campo elétrico na superfície do IT a corrente superficial produz um campo magnético idêntico aquele produzido por um monopolo magnético no interior do material. Veja a figura 2.12.

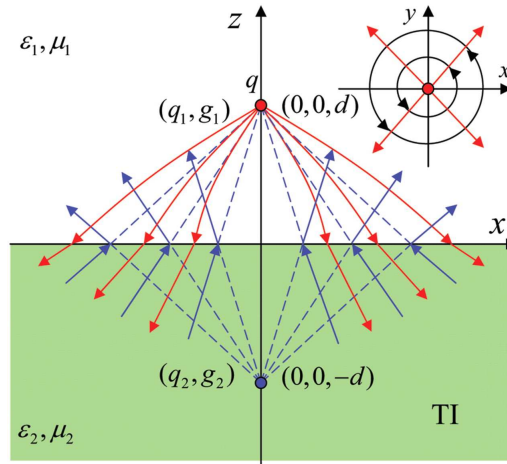


Figura 2.12: Ilustração da carga-monopolo imagem em um IT. A região $z < 0$ é ocupada por um IT e uma carga elétrica q é colocada em $(0, 0, d)$. A configuração de campos na região $z > 0$ é análoga aquela produzida por um *dyon* em $(0, 0, -d)$ e na região $z < 0$ por um *dyon* em $(0, 0, d)$. No canto superior direito é mostrada a configuração de corrente na superfície do IT devido a presença da carga q . (Fonte: referência [17].)

Outro efeito de origem topológica que permite detectar o efeito magnetoelétrico topológico é a chamada rotação topológica de Kerr e Faraday [104, 16]. Quando a luz linearmente polarizada propaga através de um meio que quebra simetria de Reversão Temporal, o plano de polarização da luz transmitida pode girar, o que é chamado de efeito Faraday. Uma rotação similar ocorre para a luz refletida por uma superfície que viola \mathcal{T} , o que é chamado de efeito Kerr magnético-ótico. Como IT preservam \mathcal{T} no *bulk* o efeito Faraday não ocorre, porém quando a simetria de Reversão Temporal é quebrada na superfície ocorrendo o efeito magnetoelétrico topológico, um efeito Kerr e Faraday diferentes ocorrem devido a resposta eletromagnética topológica dos IT. Tanto a luz transmitida quanto a refletida possuem ângulos de rotação de Kerr e Faraday que dependem das propriedades topológicas do *bulk* dos IT [104, 16]. Este efeito (rotação topológica de Kerr e Faraday) pode ser usado para observar as propriedades topológicas do *bulk* do material [104, 16]. Outros efeitos associados aos IT são discutidos nos artigos de revisão [13, 14, 15, 11, 9].

Capítulo 3

Espalhamento dos portadores de carga no grafeno induzidos por defeitos na rede

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos no estudo do comportamento dos portadores de carga na presença de defeitos na estrutura cristalina do grafeno. São considerados três tipos de defeitos: buracos, pentágonos e heptágonos. Estes podem ser incorporados na rede pela remoção ou inserção de alguns átomos de carbono. Entender como estes defeitos modificam as propriedades de transporte do grafeno é importante para a construção de aparelhos eletrônicos baseados em grafeno, pois tais defeitos podem surgir naturalmente no processo de fabricação de tais estruturas. Este capítulo é baseado nas referências [27, 42].

3.1 Dinâmica dos portadores de carga em uma folha de grafeno não simplesmente conexa

Uma das características que atraíram muita atenção no grafeno foi o grande livre caminho médio dos portadores, o que tornou este material muito atraente para aplicações em eletrônica [21]. Já nos primeiros experimentos em temperatura ambiente, transporte

balístico de até $1\mu\text{m}$ foram observados [28]. Altas mobilidades¹ da ordem de $15000\text{ cm}^2/\text{Vs}$ já foram observados no grafeno, porém de um ponto de vista de aplicações em eletrônica é interessante obter valores ainda maiores [105]. Portanto entender o espalhamento dos portadores de carga em grafeno é de extrema relevância, tanto do ponto de vista teórico quanto do experimental para que se possa chegar a aplicações práticas do mesmo, como por exemplo em dispositivos eletrônicos.

Vamos considerar o espalhamento dos portadores de carga em uma folha de grafeno não simplesmente conexa. No modelo contínuo para o grafeno é considerado que há um buraco de raio r_0 cortado da folha de grafeno e localizado na origem. Desta forma as partículas se movem em uma superfície bidimensional ($2D$) dada por um *manifold* não-simplesmente conexo que pode ser visualizado como um defeito no material. Este modelo permite a investigação dos efeitos do espalhamento como uma função do raio do buraco e pode dizer algo sobre a alta mobilidade dos portadores de carga no grafeno, fato este observado experimentalmente [51, 105]. É interessante também comparar este caso com o espalhamento por um potencial de curto alcance, porque no caso do grafeno a contribuição de pequenos defeitos que produzem este tipo de potencial para a resistividade é extremamente menor que a contribuição de tais defeitos em materiais convencionais, em que o gás de elétrons bidimensional possui uma dinâmica não relativística [34, 105].

Um buraco circular na folha de grafeno pode ser visto como um potencial esfericamente simétrico e considerando que não há absorção de partículas pelo potencial, o único efeito do buraco (ou do potencial produzido pelo buraco) é produzir uma mudança de fase na função de onda que descreve os portadores de carga. O desvio de fase causado pelo potencial está relacionado a interação dos portadores de carga com o defeito que causa o potencial. Para determinar esse desvio de fase da função de onda espalhada, bem como a seção de choque para o espalhamento, é preciso resolver a equação de Dirac (1.18) (ou 1.21) em $(2+1)$ dimensões, a qual descreve a dinâmica dos portadores de carga. Para o caso de

¹A mobilidade de portadores de carga μ é definida como sendo a razão entre a velocidade de deriva v_d atingida pelos portadores pelo campo elétrico aplicado, $v_d = \mu E$ [53].

partículas de massa nula, esta pode ser escrita em uma forma covariante como abaixo:

$$i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x) = 0, \quad (3.1)$$

onde a derivada covariante é $\partial_\mu = [(1/v_F)\partial/\partial t, \partial/\partial x, \partial/\partial y]$, as matrizes γ são $\gamma^0 = \sigma^z$, $\gamma^1 = i\sigma^y$ and $\gamma^2 = -i\sigma^x$, que obedecem as relações $\gamma^\mu\gamma^\nu = \eta^{\mu\nu} - i\epsilon^{\mu\nu\alpha}\gamma_\alpha$, $\eta^{\mu\nu}$ é o tensor métrico de Minkowski, $\text{diag}(\eta^{\mu\nu}) = (+1, -1, -1)$ e $\epsilon^{\mu\nu\alpha}$ é o símbolo de Levi-Civita tridimensional ($\epsilon^{012} \equiv +1$). A palavra covariante deve ser usada cuidadosamente neste contexto porque v_F não é nenhuma velocidade invariante de Lorentz, sendo apenas um parâmetro que depende do material, sendo o termo covariante usado apenas como referência a forma que a equação é escrita. As soluções da equação de Dirac livre, para partículas com massa nula podem ser expandidas em ondas planas, como discutido no apêndice A, mas usando-se a invariância rotacional que permite separar a variável θ , diagonalizando o momento angular, $\mathcal{J} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{2}\sigma^3$, levando a ondas parciais com momento angular $(n + \frac{1}{2})\hbar$, que assumem a forma,

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma^3)\theta} u_n(r) e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.2)$$

As componentes do espinor radial $u_n(r)$, dadas por $f_n(r)$ e $g_n(r)$, satisfazem às equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acopladas:

$$\frac{dg_n(r)}{dr} - \frac{n}{r}g_n(r) = \frac{iE}{\hbar v_F} f_n(r), \quad (3.3)$$

$$\frac{df_n(r)}{dr} + \frac{n+1}{r}f_n(r) = \frac{iE}{\hbar v_F} g_n(r), \quad (3.4)$$

onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o número quântico do momento angular. Estas equações podem ser desacopladas levando a equações de Bessel de ordem n e $n+1$, para as componentes do espinor:

$$\frac{d^2 f_n(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_n(r)}{dr} + \left(k^2 - \frac{n^2}{r^2}\right) f_n(r) = 0, \quad (3.5)$$

$$\frac{d^2 g_n(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dg_n(r)}{dr} + \left(k^2 - \frac{(n+1)^2}{r^2}\right) g_n(r) = 0, \quad (3.6)$$

sendo $k = \frac{E}{\hbar v_F} > 0$ (aqui considera-se apenas soluções com $E > 0$ que descrevem a dinâmica eletrônica, sendo as soluções com $E < 0$ descrevendo a dinâmica dos buracos). Lembrando

que as componentes do espinor no grafeno descrevem a contribuição das sub-redes para a condução, com o spin real das partículas não sendo considerado nessa primeira aproximação de baixas energias. A solução para a parte radial do espinor na região fora do buraco (i.e., para $r > r_0$) é dada por:

$$u_n(r) = \begin{pmatrix} f_n(r) \\ g_n(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{1n} J_n(kr) + B_{2n} N_n(kr) \\ B_{3n} J_{n+1}(kr) + B_{4n} N_{n+1}(kr) \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

onde J_n e N_n são as funções de Bessel do primeiro e do segundo tipo (função de Neumann), respectivamente e B_{jn} ($j = 1, 2, 3, 4$) são constantes que devem ser determinadas pelas condições de contorno e pela condição de normalização que definem o problema, de um ponto de vista matemático, completamente. De um ponto de vista físico, as condições de contorno corretas são determinadas impondo-se que o fluxo de energia no interior do buraco seja nulo, uma região ausente de graus de liberdade da rede. Conseqüentemente, os campos devem combinar-se de uma maneira que o fluxo de energia das ondas *incoming* (aquelas que propagam em direção ao buraco e comportam assintoticamente como e^{-ikr}) cancelam o fluxo das ondas *outgoing* (propagando-se para fora do buraco).

Recordando que no caso sem o buraco, têm-se (veja o apêndice A):

$$u_n(r) = \begin{pmatrix} B_{1n} J_n(kr) \\ B_{3n} J_{n+1}(kr) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

O desvio de fase δ_n , é obtido comparando-se o comportamento assintótico $r \rightarrow \infty$, das funções de onda que descrevem os portadores na presença e na ausência do potencial espalhador. No caso livre, na ausência de um potencial espalhador, o limite assintótico da solução (3.8) [106] é:

$$u_n^A(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos \left(kr - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_n^A \right), \quad (3.9)$$

$$u_n^B(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos \left(kr - \frac{(n+1)\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_n^B \right), \quad (3.10)$$

onde os índices do espinor A e B representam as sub-redes do cristal. Impondo condições de contorno de Neumann (NCC) nas funções de onda, (3.7), na borda do buraco, $\frac{\partial u_n}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = 0$,

obtêm-se:

$$u_n(r) = \begin{pmatrix} B_{1n}[J_n(kr) - \tan(t_n(kr_0))N_n(kr)] \\ B_{3n}[J_{n+1}(kr) - \tan(t_{n+1}(kr_0))N_{n+1}(kr)] \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

onde

$$\tan[t_n(kr_0)] = \frac{J'_n(kr_0)}{N'_n(kr_0)}. \quad (3.12)$$

Os termos proporcionais à função de Bessel (Neumann) descrevem as ondas incidentes (espalhadas). Comparando-se seu comportamento assintótico com aqueles para ondas livres (sem o buraco na rede), equação (3.9) e (3.10) obtêm-se os desvios de fase. No limite assintótico, a função de onda espalhada $u_n(r)$ comporta-se como:

$$u_n^A(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos \left(kr - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + t_n(kr_0) \right), \quad (3.13)$$

$$u_n^B(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \longrightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos \left(kr - \frac{(n+1)\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + t_{n+1}(kr_0) \right), \quad (3.14)$$

determinado o desvio de fase δ_n da n -ésima onda parcial que completamente determina o problema de espalhamento fermiônico:

$$\delta_n^A = t_n(kr_0), \quad (3.15)$$

$$\delta_n^B = t_{n+1}(kr_0). \quad (3.16)$$

Os desvios de fase para os portadores das duas sub-redes são idênticos, apenas o momento angular n e $n+1$ é diferente para os portadores associados a diferentes sub-redes. De fato deve-se obter apenas um desvio de fase para ambos os portadores de carga, pois a equação de Dirac em (2+1) dimensões possui apenas um grau de liberdade [107].

Para ser mais específico considere a situação em que existe uma pequena concentração n_{def} de defeitos pontuais na folha de grafeno, com uma seção de espalhamento angulo-dependente, $\sigma(\theta)$. Então a contribuição destes defeitos na rede para a resistividade, ρ , lê-se [34, 105, 108]:

$$\rho = \frac{2}{e^2 v_F^2 N(E_F) \tau(k_F)}, \quad (3.17)$$

sendo:

$$\frac{1}{\tau(k_F)} = n_{\text{def}} v_F \int_0^{2\pi} d\theta \frac{d\sigma(\theta)}{d\theta} (1 - \cos \theta), \quad (3.18)$$

onde $N(E_F) = 2k_F/\pi\hbar v_F$ é densidade de estados no nível de Fermi, considerando-se a degenerescência quádrupla do grafeno entre spin e vale e k_F é o vetor de onda de Fermi dado por $k_F = \sqrt{\pi n}$, sendo n a concentração de portadores de carga. τ é o livre caminho médio para os portadores de carga.

As equações (3.17) e (3.18) são derivadas da equação semi-clássica de Boltzmann e não leva em consideração correções devido a localização ou antilocalização dos portadores de carga. Estas correções podem modificar os resultados apenas no caso quântico extremo quando a resistividade é da ordem de h/e^2 e a concentração de defeitos na rede é muito pequena [109, 108]. Aqui ficaremos restritos ao caso $\rho \gg h/e^2$. A aplicabilidade das equações (3.17) e (3.18) para férmions de Dirac foi provada em [109], onde foi mostrado que longe dos pontos de Dirac, espalhamento entre bandas (espalhamento entre elétrons e buracos) resultam em correções negligenciáveis para a condutividade [109, 105].

Para elétrons da sub-rede A a seção diferencial de choque em termos dos desvios de fase é dada por [34, 105]:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\theta} = \frac{2}{\pi k} \left| \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} t_n(kr_0) e^{i\theta} \right|^2. \quad (3.19)$$

A equação de Dirac (3.3) e (3.4) ou (3.5) e (3.5) tem uma importante simetria sob a troca $f \longleftrightarrow g$, $n \longleftrightarrow -n - 1$ que implica que $t_n = t_{-n-1}$. Assim, a equação (3.19) pode ser escrita na forma:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\theta} = \frac{2}{\pi k} \left| \sum_{n=0}^{n=\infty} t_n(kr_0) \cos[(n + 1/2)\theta] \right|^2. \quad (3.20)$$

Para pequenas energias, $kr_0 \ll 1$, que é típico para os portadores no grafeno, têm-se:

$$\delta_n^A = t_n(kr_0) \simeq \frac{(2n + 1)[(2n + 3)n - (kr_0)^2]}{[(2n + 1)!!]^2(2n + 3)(n + 1)} (kr_0)^{2n+1}, \quad (3.21)$$

e assim o espalhamento dos estados eletrônicos em orbitais s ($n = 0$) dominam. Com as equações (3.20) e (3.21) a contribuição das impurezas para a resistividade pode ser estimada como sendo

$$\rho \simeq n_{\text{def}} \frac{h}{e^2 k k_F} (kr_0)^6. \quad (3.22)$$

Isto significa que o espalhamento induzido por pequenos buracos (com raio em torno de alguns angstroms, alguns espaçamentos de rede, em baixa concentração são irrelevantes

para o transporte eletrônico no grafeno, determinando uma contribuição negligenciável para a resistividade. Para o caso de um potencial $V(r) = V_0$ para $r < R_0$ e $V(r) = 0$ para $r > R_0$, a estimativa para a resistividade é $\rho \simeq (h/4e^2)n_{\text{def}}R_0^2$, [34], determinando também uma contribuição negligenciável quando o raio do potencial R_0 é da ordem de distâncias interatômicas e a concentração é pequena.

Para um intuitivo entendimento do resultado (3.22) vamos recordar que a luz não sente obstáculos com tamanhos muito menores que o seu comprimento de onda. Como elétrons de Dirac com massa nula possuem a mesma relação de dispersão que a luz, comportando-se como tal em alguns aspectos (dualidade onda partícula), esta mesma interpretação pode explicar os resultados para um potencial de curto alcance [105]. Os resultados obtidos acima para a resistividade estão em acordo com aqueles apresentados na referência [105], onde os autores mostraram que ondulações intrínsecas da folha de grafeno criam um potencial espalhador de longo alcance, que levam a uma contribuição significativa para a resistividade e que podem explicar os dados experimentais existentes sobre a resistividade do grafeno [105]. Para mais detalhes sobre espalhamento dos portadores de carga por defeitos no grafeno veja, por exemplo [105, 110, 111, 108] e as referências citadas nestes trabalhos.

Recentemente, nos trabalhos [40, 112], foi proposto que buracos na folha de grafeno poderiam ser utilizados para se fazer um sequenciamento de moléculas de DNA. Na referência [112] os autores descrevem a fabricação de buracos na folha de grafeno com diâmetros entre 5 e 23 nanômetros utilizando um feixe de elétrons. Como discutido na introdução o método de sequenciamento do DNA consiste em passar a fita através do buraco e medir a corrente iônica ou de tunelamento que percorre a folha de grafeno. A medida que as bases do DNA vão se deslocando pelo buraco esta corrente muda, possuindo valores diferentes para bases diferentes e pode-se fazer o sequenciamento do DNA [40, 112]. Considerando uma velocidade da fita de DNA de 10 nanosegundos por base permite uma resolução capaz de sequenciar a fita [40]. Porém, o sequenciamento de DNA utilizando grafeno esbarra em dificuldades, sendo a principal delas um grande ruído na corrente. Uma forma de reduzir este ruído é considerando buracos cada vez menores, porém o

controle do diâmetro de buracos menores que 5 nanômetros é difícil. Mas, como discutido anteriormente, a contribuição para a resistividade devido a buracos de raios pequenos é negligenciável, portanto, não é necessário um conhecimento preciso do diâmetro de tais defeitos para se calcular a corrente que percorre cada base nitrogenada. De fato, na literatura ainda não existia uma demonstração deste fato.

3.2 Dinâmica dos portadores de carga na presença de defeitos pentagonais e heptagonais

Ondulações na folha de grafeno são inevitáveis porque cristais bidimensionais são extremamente flexíveis e suaves, se curvando para serem estáveis. Folhas de grafeno são naturalmente curvas e este tipo de distorção conduz a uma mobilidade para os portadores que é independente da concentração [105]. Quando o grafeno é crescido sobre um substrato como SiO_2 a interação com esse causa ondulações na folha de grafeno. Qualquer que seja a origem das ondulações no grafeno elas devem atuar como uma fonte de espalhamento adicional para os portadores. Dessa forma nós investigamos o espalhamento dos portadores de carga causado por ondulações cônicas. Estas deformações podem ser incorporadas na rede no processo de fabricação do grafeno, por exemplo, pela troca de um hexágono de átomos de carbono por um pentágono ou heptágono, ou seja, ausência ou inserção de um átomo de carbono, e podem também ser vistas como defeitos topológicos da rede, pois modificam a topologia das ligações químicas na folha de grafeno [113, 114].

Defeitos topológicos na rede hexagonal do grafeno surgem então como um resultado da remoção ou inserção de um ou vários átomos de carbono na rede, sem afetar o número de ligações químicas destes, que no grafeno são três [113, 114]. Assumindo que o tamanho dos defeitos topológicos é pequeno, o interesse será no estudo da influência de tais defeitos na dinâmica dos portadores, particularmente, no espalhamento dos portadores por tais defeitos [27, 42]. As considerações serão baseadas no modelo contínuo (1.18) e (1.21) considerando os defeitos como puntiformes.

Considere então que defeitos pentagonais e heptagonais são introduzidos na rede.

A substituição de um hexágono por outro polígono com $n = 6 - n_d$ lados, onde n_d é um inteiro menor que 6, na rede sem afetar o número de ligações dos átomos de carbono, conduz ao encurvamento da folha de grafeno. Estes defeitos podem ser vistos como declinações da rede que adquire uma curvatura local. A acumulação de vários defeitos pode levar a formas fechadas como fulerenos. Aneis com $n < 6$ lados ($n_d > 0$) conduzem a uma estrutura com curvatura positiva, e polígonos com $n > 6$ lados ($n_d < 0$) conduzem a uma rede com curvatura negativa. Esta curvatura induzida existe somente próximo ao defeito, sendo que longe do defeito a folha de grafeno permanece plana, como no caso de superfícies cônicas que são planas fora do ápice [50, 113, 114]. Inclusão de um mesmo número de pentágonos ($n_d = 1$) e heptágonos ($n_d = -1$) mantém a folha plana em grandes escalas, mas introduz curvaturas próximas aos defeitos. Tal estrutura deve ser estável e ter propriedades eletrônicas distintas daquelas apresentadas por folhas planas ou com somente pentágonos ou heptágonos [113].

Explorando a característica $2D$ e a flexibilidade do material, a idéia é propor um sistema onde um ou mais setores são excitados do grafeno e o restante é unido (Fig. 3.1). Em fato a ligação faltante de cada átomo de carbono da borda pode ser completada com a outra extremidade, assim, a folha de grafeno com um setor faltando, pode em princípio ser covalentemente ligada. A nucleação e o crescimento de estruturas de carbono curvas é bem entendida. A ocorrência de pentágonos, que levam a defeitos (declinações 60°) em uma rede de grafite hexagonal é um elemento chave neste cenário. Particularmente, considerando a simetria de uma folha de grafite e o teorema de Euler, pode-se mostrar que somente cinco tipos de cones (incorporando de um a cinco pentágonos) podem ser feitos [115, 116]. No caso de um cone com $n_d > 0$, o valor n_d , ($n_d = 1, \dots, 5$) é relacionado ao ângulo cônico α que a superfície do cone faz com seu eixo de simetria:

$$\sin \alpha = 1 - \frac{n_d}{6}. \quad (3.23)$$

A remoção de um setor da folha de grafeno introduz um déficit de ângulo no espaço como mostrado na figura 3.1 sendo o alcance angular da folha de grafeno dado por $0 \leq \theta < 2\pi(1 - n_d/6)$. Isto corresponde a remoção de setores de 60° , 120° , 180° , 240° e 300°

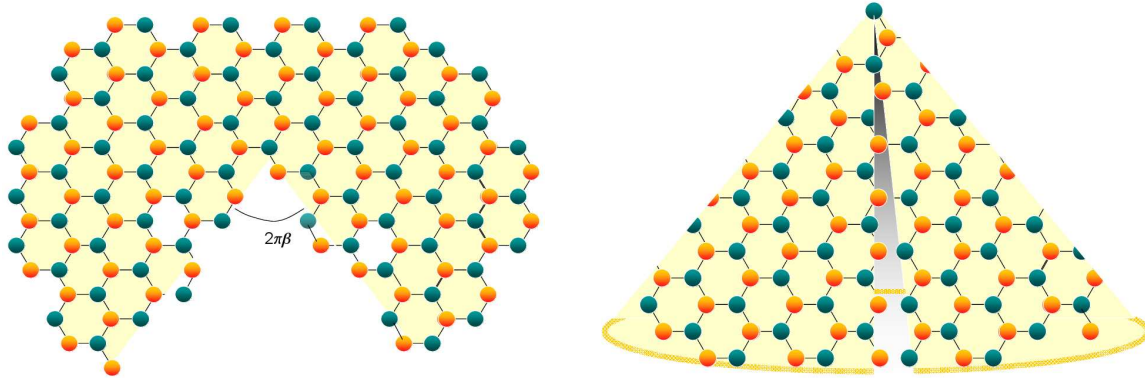


Figura 3.1: Removendo um setor angular $2\pi\beta$ da folha de grafeno (esquerda) e identificando as bordas (direita), resulta em um cone. O movimento dos portadores de carga em uma folha de grafeno cônica é equivalente aquele de uma partícula de Dirac de massa nula em um campo gravitacional de uma partícula de massa M estática, em um espaço-tempo com $(2+1)D$. (Fonte: referência [27]).

($n_d = 1, 2, 3, 4$ e 5). O defeito pentagonal pode ser representado como um pseudo vórtice magnético no ápice do cone de grafeno, sendo o fluxo do vórtice relacionado ao déficit de ângulo do cone (veja referência. [114]). Os cinco cones de grafite mencionados anteriormente, possíveis de serem construídos são dados por $\alpha = 19.2^\circ, 38.9^\circ, 60^\circ, 84.6^\circ, 112.9^\circ$ e já foram sintetizados e observados [115, 116, 117]. Cones com heptágonos possuem curvatura negativa e são obtidos por uma inserção de um setor angular na folha de carbono. Então, se $n_d < 0$, $-n_d$ conta o número de tais setores inseridos na folha de grafeno.

A proposta aqui é analisar a influência que tais estruturas de grafeno especiais podem induzir na função de onda dos portadores de carga (espinores). Tais influências podem criar novas perspectivas nas propriedades de transporte eletrônicas, que são determinadas pelas quasepartículas, restritas a se moverem na superfície cônica. Como apenas a rede hexagonal do grafeno determina a relação de dispersão linear $E = \pm v_F |\vec{p}|$, defeitos e distorções na rede devem ser minimizados sempre que possíveis quando construir os cones, ou seja, o número de setores inseridos ou removidos deve ser mantido um mínimo. Vamos considerar também que o ápice dos cones produzidos é puntiforme, o que de um ponto de vista experimental não é verdade, por exemplo, um pentágono cria um cone cujo ápice é arredondado no ponto onde o pentágono se encontra. Como na seção anterior vamos considerar o espalhamento

dos portadores de carga no grafeno induzidos por estes defeitos topológicos. Para isso uma analogia entre defeitos topológicos em física da matéria condensada e gravitação em $(2 + 1)$ dimensões espaço-temporais será utilizada [118] sempre que possível. Por exemplo, a dinâmica de portadores de carga em uma folha de grafeno cônica ideal é equivalente aquela de partículas de Dirac com massa nula em um campo gravitacional de uma massa puntiforme estática em um espaço-tempo com $(2 + 1)D$ [50, 119, 107].

No apêndice C é feita uma discussão da teoria da gravitação de Einstein em $(2+1)$ dimensões. Para estudar o problema de espalhamento dos portadores de carga no grafeno vamos considerar um dos mais simples *manifolds* curvos que é associado com a solução de Schwarzschild em $(2 + 1)$ dimensões: um espaço-tempo localmente plano com propriedades globais não triviais. Gravitação em $(2+1)$ dimensões difere fundamentalmente da teoria em quatro dimensões e exibe algumas características não usuais que podem ser deduzidas das propriedades das equações de campo de Einstein e do tensor de curvatura de Riemann $R^\mu_{\nu\epsilon\kappa}$ [119, 120]. Em regiões livres de matéria (onde o tensor de energia-momento $T^{\mu\nu}$ anula-se), o espaço-tempo é localmente plano quando a constante cosmológica se anula. Contudo isto não significa que uma fonte massiva não tem efeitos gravitacionais: um feixe de luz passando por uma massa puntiforme será defletido [120, 121, 122, 123] e transporte paralelo em um circuito fechado em torno de uma massa puntiforme geralmente determina resultados não triviais [124, 125]. Já, enquanto a curvatura local se anula fora das fontes, há efeitos globais não triviais. Por exemplo, considere uma massa puntiforme m localizada na origem em repouso. A solução das equações de campo de Einstein neste caso é dada pela métrica:

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - r^2\eta^2 d\theta^2, \quad (3.24)$$

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad \eta = 1 - 4GM. \quad (3.25)$$

Uma massa puntiforme m na origem cria um espaço-tempo localmente plano, mas com uma identificação global de coordenadas não-trivial que revela a presença de uma partícula puntiforme massiva [126]. A identificação é:

$$(t, r, \phi) \rightarrow (t, r, \phi + 2\pi(1 - 4GM)). \quad (3.26)$$

A parte espacial da métrica é aquela de um cone cujo ângulo de abertura (ângulo que a superfície faz com seu eixo de simetria) depende do valor da massa m sendo dado por:

$$\sin \alpha = 1 - 4Gm. \quad (3.27)$$

Quanto maior a massa M mais pontiagudo é o cone.

Para estudar o problema de espalhamento de férmions de Dirac em um cone o sistema de coordenadas embebidas é mais conveniente porque a variável angular θ varia em todo o intervalo $0 < \theta \leq 2\pi$ [107]. Dessa forma, a decomposição das funções de ondas em ondas parciais com um momento angular bem definido é possível e a identificação dos desvios de fase se torna mais fácil, o que seria mais complicado se usássemos um sistema de coordenadas onde $0 < \theta \leq 2\pi\eta$, como o apresentado acima. Não há interação, ou seja a equação de onda que descreve os portadores de carga é livre, exceto que as derivadas são covariantes com relação a métrica do sistema de coordenadas embebidas.

No sistema de coordenadas embebidas no espaço Euclidiano tridimensional r e θ estendem sobre todo o alcance $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e descrevem um cone com a restrição $z = \sqrt{(\eta^{-2} - 1)(x^2 + y^2)}$, sendo o elemento de linha dado por [107]:

$$ds^2 = dt^2 - \eta^{-2}dr^2 - r^2d\theta^2. \quad (3.28)$$

Embora a situação pareça trivial, os atributos da fonte de gravitação (massa, spin se for o caso) são contidos nas propriedades globais das coordenadas planas. Todas as informações residem em condições de contorno não triviais que são cruciais no estudo do movimento de partículas puntiformes, neste espaço-tempo, tanto classicamente, como do ponto de vista quântico [107, 127].

No caso de defeitos topológicos no grafeno o termo gravitacional $4GM$ deve ser identificado com β , de forma que $2\pi\beta$ (para $0 < \beta < 1$) determina o déficit de ângulo, medindo a magnitude do setor removido, onde $-2\pi\beta$ (para $-\infty < \beta < 0$) conta o excesso de ângulo associado com a inserção de um setor. O parâmetro β assume somente valores discretos devido a simetria da rede do grafeno como discutido após a equação (3.23), sendo dado por:

$$\beta = \frac{n_d}{6}, \quad \text{e} \quad \eta = 1 - \beta = 1 - \frac{n_d}{6}. \quad (3.29)$$

Antes de analisar o espalhamento por defeitos cônicos (pentágonos e heptágonos) quanticamente, vamos fazer uma digressão sobre o espalhamento dos portadores de carga como se eles fossem partículas clássicas relativísticas. A equação clássica de movimento determinada pela equação da geodésica relativística para partículas em um cone lê-se: $\ddot{x} + \Gamma_{\alpha\beta}^{\mu} \dot{x}^{\alpha} \dot{x}^{\beta} = 0$, onde o ponto significa diferenciação com respeito a qualquer coordenada afim τ que parametriza o caminho $x^{\mu}(\tau)$ e $\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu}$ é a conexão ou símbolo de Christoffel [107] (veja o apêndice C para mais detalhes). O ângulo de espalhamento $\pm\omega$ para o movimento das partículas em um cone pode ser obtido por integração das equações de movimento clássicas e é dado por [107]:

$$\pm\omega = \pm\pi(\eta^{-1} - 1) = \pm\pi\frac{\beta}{1 - \beta} = \pm\pi\frac{n_d}{6 - n_d}, \quad (3.30)$$

onde \pm refere-se ao lado que a trajetória dos portadores (corrente) passa, veja a figura 3.2. Note que o resultado acima é válido para todos valores de β apesar de o setor ser inserido ou removido da folha de grafeno. O ângulo de espalhamento acima, apresentado no sistema de coordenadas embebidas, mede a deflexão do movimento assintótico no cone projetado no plano $x - y$ das coordenadas embebidas do espaço tridimensional. O resultado acima sugere que um pentágono ou heptágono pode ser usado para desviar a corrente planar no grafeno.

Para obter os desvios corretos (quânticos) da corrente no grafeno temos que resolver a equação de Dirac (1.18) (ou (1.21)) definida em um cone. Vamos considerar aqui que o espalhamento dos portadores de carga pelos defeitos pentagonais e heptagonais não misturam os portadores associados aos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' , assim pode-se considerar o espalhamento dos portadores de carga associados a cada ponto de Dirac separadamente. Esta é uma boa aproximação enquanto a descrição efetiva (1.18) e (1.21) for válida, pois a conservação da helicidade impede que portadores associados a um cone de Dirac espalhem em estados associados ao outro cone, pois eles possuem helicidades diferentes [23]. Em um sistema de coordenadas curvas a equação de Dirac para os portadores próximo ao ponto \vec{K} é dada por [107]:

$$i\hbar\gamma^{\mu}E_a{}^{\mu}D_{\mu}\psi = 0, \quad (3.31)$$

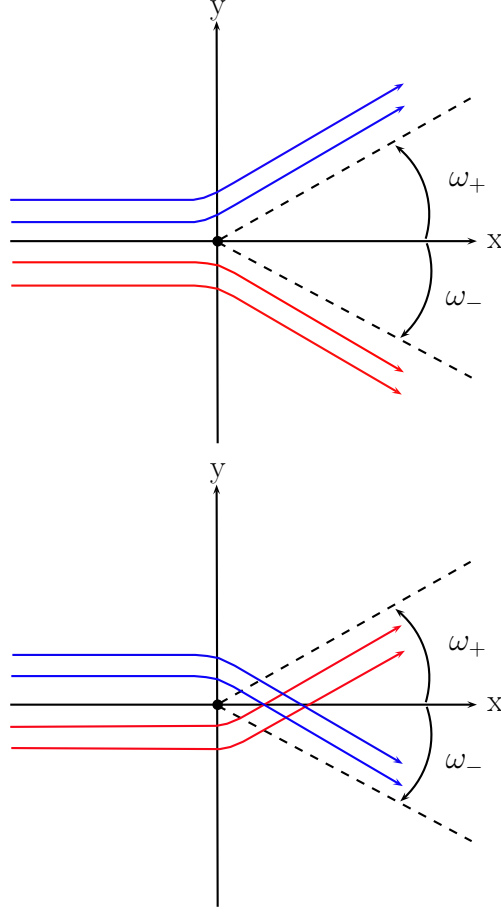


Figura 3.2: Trajetórias clássicas (azul e vermelho) das partículas espalhadas por heptágonos (acima) e por pentágonos (abaixo). As trajetórias são o movimento assintótico do cone projetados no plano $x - y$ das coordenadas tridimensionais embebidas, veja o texto. (Fonte: referência [27].)

onde $D_\mu = \partial_\mu + \frac{1}{2}\omega_{\mu;ab}\sigma^{ab}$, é a derivada covariante, $\sigma^{ab} = \frac{1}{4}[\gamma^a, \gamma^b]$, e E_a^μ é o *dreibein* em coordenadas (t, r, θ) . A conexão de spin $\omega_{\mu;ab} = -\omega_{\mu;ba}$ pode ser escrita em três dimensões como $\omega_{\mu;ab} = \epsilon_{abc}\omega_\mu^c$ com ϵ_{abc} o símbolo de Levi-Civita como anteriormente [107]. A invariância rotacional do problema capacita-nos a escolher soluções de energia positiva que são autofunções do momento angular, com autovalor $(n + \frac{1}{2})\hbar$:

$$u_n(r)e^{-iEt/\hbar} = e^{i(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma^3)\theta} \begin{pmatrix} u_n^A(r) \\ u_n^B(r) \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.32)$$

onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. As soluções para $E > 0$, que descrevem a dinâmica dos elétrons na banda de condução são [107]:

$$u_n^A(r) = (\epsilon_n)^n J_\nu(\kappa r), \quad (3.33)$$

$$u_n^B(r) = (\epsilon_n)^{n+1} J_\nu(\kappa r). \quad (3.34)$$

Aqui, J_ν é a função de Bessel de ordem $\nu \equiv \frac{\epsilon_n}{\eta}(n + \frac{(1 \mp \eta)}{2})$, sendo os dois sinais associados as duas componentes do espinor. $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\kappa = E/\hbar v_F \eta$, $E > 0$, $\epsilon_n = \pm 1$ e o mesmo sinal, tem que ser escolhido para as componentes superior e inferior de $u_n(r)$. Para $0 < \eta \leq 1$ ou $0 < \beta \leq 1$ (lembre-se que $\eta = 1 - \beta$) deve-se escolher $\epsilon_n = \text{sign}(n + (1 - \eta)/2) = \text{sign } n$, ($\text{sign } 0 \equiv 1$) para ter ambas componentes regulares na origem. Note que a ordem das funções de Bessel é fracionária, estando associada ao déficit ou excesso de ângulo no espaço. Isto é uma consequência direta das condições de contorno não triviais que os defeitos topológicos introduzem na coordenada angular θ .

O único efeito que estes defeitos podem causar na função de onda é modificar sua fase, pois não são capazes de criar nem absorver portadores de carga. Para obter os desvios de fase é necessário obter a forma assintótica das funções de Bessel (eles são idênticos para as componentes superior e inferior) que são dadas por [107]:

$$\begin{aligned} \delta_n &= -\epsilon_n \frac{\pi}{2\eta} \left((1 - \eta)n + \frac{(1 - \eta)}{2} \right) \\ &= -\frac{\epsilon_n}{2} \pi \frac{\beta}{1 - \beta} \left(n - \frac{1}{2} \right), \\ &= -\frac{\epsilon_n}{2} \pi \frac{n_d}{6 - n_d} \left(n - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\epsilon_n = \text{sign} \left(n + \frac{(1 - \eta)}{2} \right) = \text{sign} \left(n + \frac{\beta}{2} \right). \quad (3.36)$$

O desvio de fase depende do número de setores removido ou inserido na folha de grafeno, medidos por $\eta = 1 - \beta = 1 - n_d/6$ e também do momento angular dos portadores de carga. Os desvios de fase são idênticos para as duas componentes do espinor porque a equação de Dirac em (2+1) dimensões possui apenas um grau de liberdade, sendo assim há apenas um desvio de fase [107].

Se $-\infty < \beta < 0$, é preciso tomar um pouco de cuidado porque $\epsilon_n = \pm 1$ dependendo do valor de $(n + \beta/2)$ (mas o desvio de fase permanece como acima) e o desvio de fase depende somente do número de setores (heptágonos) inseridos na folha de grafeno. Na

presença de heptágonos a dinâmica de portadores é idêntica ao movimento de elétrons no campo gravitacional de uma massa negativa (embora não possível em gravitação, isto é realizável no presente contexto).

Note que o desvio de fase (3.35) mede a deflexão do movimento assintótico no cone projetado no plano $x - y$ sendo qualitativamente idêntico ao caso clássico discutido anteriormente. Quando há um pentágono na rede e a corrente fermiônica é restrita para passar em torno e suficientemente próximo dele, a corrente é espalhada pelo defeito com um ângulo, que depende somente do número de setores removidos na folha de grafeno e no lado que a corrente passa (veja fig. 3.2). Depois de passar pelo pentágono as trajetórias da corrente espalhada se cruzam e levam a uma figura de interferência que pode ser utilizada para se detectar a presença de tais defeitos na rede, por meio de uma experiência tipo-Young. No caso de um heptágono a corrente é espalhada, mas as trajetórias divergem uma da outra.

A presença de pentágonos ou heptágonos na folha de grafeno pode se manifestar como flutuações na concentração dos portadores de carga, modificando várias de suas propriedades. Por exemplo, em uma folha de grafeno planar sabe-se que a interação de elétrons entre sub-redes produz um campo magnético efetivo que é proporcional em magnitude e direção ao momento eletrônico medido a partir dos cantos da zona de Brillouin. Este campo efetivo, que atua no pseudospin pode ter importantes mudanças no grafeno cônico, porque a interação de um portador que estava previamente na sub-rede A deverá fazer ele tornar-se fora de fase com todas quasepartículas ocupando a sub-rede B .

Os resultados apresentados anteriormente mostram que defeitos topológicos podem ser utilizados para se criar canais de corrente elétrica no grafeno ou dispositivos que dividem a corrente em vários canais. Outros aspectos do estudo de defeitos topológicos pentagonais e heptagonais no grafeno podem ser encontrados nas referências [50, 128, 129].

Capítulo 4

Isolante Topológico Cônico

Isolantes Topológicos invariantes sob Reversão Remporal, possuem um *gap* de energia em seu interior e excitações com massa nula na superfície com um número ímpar de cones de Dirac. Quando a superfície é coberta por um filme magnético a simetria de reversão temporal é quebrada e um *gap* de energia pode abrir também na superfície do IT. Neste caso a teoria efetiva de baixas energias dos estados superficiais é completamente descrita pelo termo topológico na ação (2.36). Este termo descreve um EHQ na superfície do IT. Sabe-se que o valor de $\theta = (2n + 1)\pi$ determina uma condutância Hall quantizada dada por $\sigma_{xy} = (n + 1/2)e^2/h$, sendo este EHQ na superfície a origem física do efeito magnetoelétrico topológico [17].

Aqui propõe-se uma investigação desse efeito na superfície de um cone, ou seja a idéia é considerar um IT na forma de um cone coberto com um filme magnético, e investigar os efeitos de campos elétricos e magnéticos externos. Outros efeitos como a dinâmica dos portadores na superfície e efeitos de diferenças de fase entre as componentes *up* e *down* do espinor também são de interesse e serão investigados [49]. Em particular é proposto um método para se testar predições da Gravitação de Einstein em (2+1) dimensões medindo-se a polarização do IT quando este se encontra na presença de um campo \vec{E} externo, pois neste caso existe uma contribuição de origem geométrica para \vec{P} .

4.1 Efeito Hall no IT cônico

Vamos começar descrevendo a geometria cônica e algumas de suas peculiaridades. Essa geometria é muito semelhante àquela de um espaço Euclidiano bidimensional. A curvatura e a torsão são identicamente nulas em todos os pontos da superfície, exceto no ápice do cone, que possui uma singularidade. Assim, com excessão do ápice, a superfície de um cone pode ser descrita por meio de um sistema de coordenadas planas $(\rho, \tau) = (r^{1-\beta}/(1-\beta), (1-\beta)\theta)$ onde (r, θ) são as coordenadas polares usuais, veja a figura 4.1.

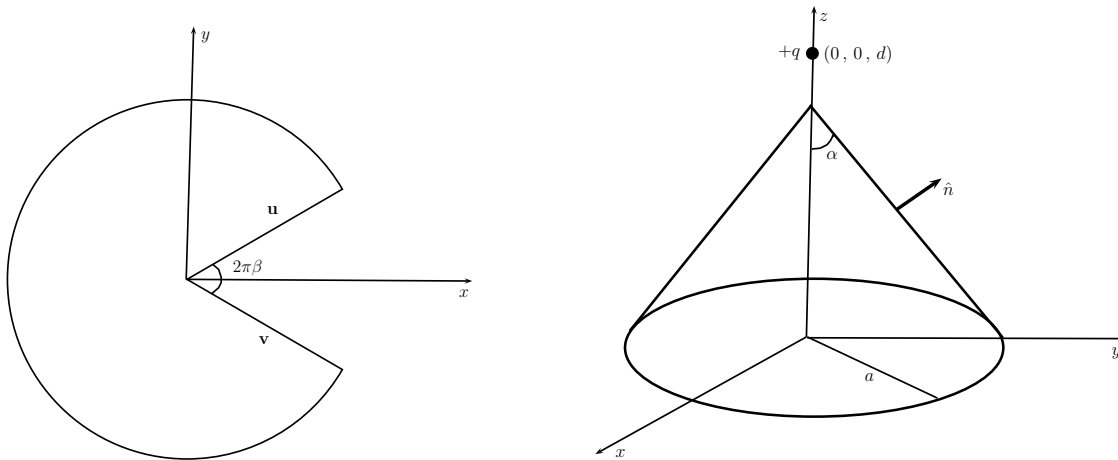


Figura 4.1: Esquerda: Remoção de um setor $2\pi\beta$ do espaço Euclidiano bidimensional e identificação das bordas $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ leva a um cone. Direita: Cone com eixo ao longo de z mostrando o ângulo de abertura α (que é relacionado a $\beta = 1 - \sin \alpha$), \hat{n} e o vetor normal à superfície. Também é mostrada a configuração de carga elétrica para se estudar o efeito magnetoelétrico topológico discutido abaixo. (Fonte: referência [49].)

Outra forma de descrever um cone é por meio da equação de sua superfície. Para um cone circular reto com eixo ao longo de z , altura c e raio da base a a equação dos pontos da superfície é dada por:

$$z = c - \frac{c}{a} \sqrt{x^2 + y^2} = c - \frac{r}{\tan \alpha}, \quad (4.1)$$

sendo que, a base se localiza no plano $x - y$. A segunda forma da equação acima é escrita em coordenadas cilíndricas (r, θ, z) , sendo α ($\tan \alpha = a/c$) o ângulo de abertura do cone (figura 4.1).

A dinâmica dos portadores de carga superficiais em um IT finito foi discutida pela primeira vez na Ref. [130]. O autor argumenta que a descrição correta dos portadores de carga superficiais é dada pela equação de Dirac, escrita em um espaço curvo, de forma que a única modificação necessária para a descrição dos portadores em um *manifold* finito e curvo, como uma esfera, é o acoplamento da equação de Dirac à curvatura do espaço. Na presença de um campo magnético externo existem estados quirais como em um IT plano e infinito e um efeito Hall quantizado na superfície do material.

Para estudar as consequências do efeito magnetoeletrico topológico no cone considere um campo elétrico externo \vec{E} aplicado na superfície do cone, e que a superfície do cone é coberta com um filme magnético com magnetização perpendicular à superfície em todos os seus pontos. Devido a presença do campo \vec{E} haverá uma corrente Hall na superfície do IT dada por:

$$\vec{j} = \pm \frac{e^2}{2h} \hat{n} \times \vec{E}. \quad (4.2)$$

O sinal \pm depende do sentido da magnetização que cobre a superfície relativo ao vetor normal \hat{n} . Em coordenadas cilíndricas $\hat{n} = \hat{r} \cos \alpha + \hat{z} \sin \alpha$. A partir daqui será considerado apenas o sinal positivo na equação acima, ou seja $\vec{M} // \hat{n}$. Para efeitos de comparação e simplicidade considere primeiro um campo elétrico constante em todos os pontos da superfície e apontado no sentido negativo do eixo z , $\vec{E} = -E_0 \hat{z}$, uma corrente superficial aparecerá em todos os pontos da superfície circulando-a dada por

$$\vec{j} = \frac{e^2}{2h} E_0 \cos \alpha \hat{\theta}. \quad (4.3)$$

Aqui α é o ângulo de abertura do cone. Observe que a corrente acima possui o mesmo valor em todos os pontos da superfície do cone e possui o maior valor para $\alpha = 0$, pois neste caso a componente do campo elétrico paralela a superfície assumiria seu valor máximo. Note que se $\alpha = \pi/2$ o cone se degenera em um plano e não existe corrente Hall induzida na superfície, pois o campo externo torna-se perpendicular à superfície e não dá contribuição para a corrente (4.3). Veja figura 4.2 que mostra um esboço desta corrente.

No caso de uma carga elétrica puntiforme, acima do ápice do cone e localizada na

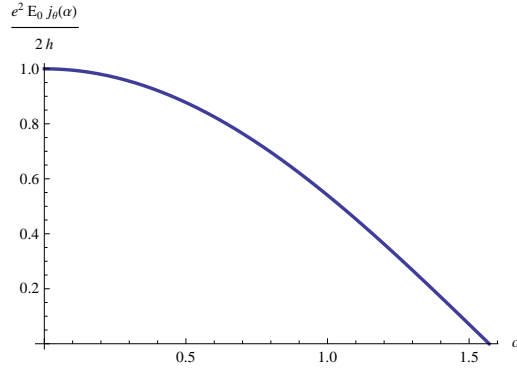


Figura 4.2: Esboço da corrente Hall induzida na superfície do IT cônico em função do ângulo de abertura do cone, medido em radianos. A corrente é induzida por um campo elétrico externo constante paralelo ao eixo z .

posição $(0, 0, d)$ o campo elétrico é dado por:

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{r\hat{r} + (z-d)\hat{z}}{(r^2 + (z-d)^2)^{3/2}}, \quad (4.4)$$

Para pontos que estão na superfície do cone as coordenadas r e z satisfazem ao vínculo (4.1).

A corrente induzida na superfície assume a forma

$$\vec{j} = \frac{q e^2}{4\pi\epsilon_0 h} \frac{[r \sin \alpha + (d-z) \cos \alpha]}{[r^2 + (z-d)^2]^{3/2}} \hat{\theta}. \quad (4.5)$$

Usando a equação (4.1) esta corrente Hall pode ser escrita apenas em termos de z , que varia desde 0 até c :

$$\vec{j} = \frac{q e^2}{4\pi\epsilon_0 h} \frac{[(c-z) \tan \alpha \sin \alpha + (d-z) \cos \alpha]}{[(c-z)^2 \tan^2 \alpha + (z-d)^2]^{3/2}} \hat{\theta}, \quad (4.6)$$

Como função do ângulo de abertura do cone α , o valor máximo dessa corrente Hall ocorre para $\alpha = 0$. Um esboço da mesma em função do ângulo de abertura do cone é mostrado na figura 4.3, em três posições diferentes na superfície do cone: na base, no meio e no ápice.

Para $\alpha = \pi/2$ os gráficos acima mostram que a corrente anula-se. Isto não é verdade. Estes gráficos foram obtidos da expressão (4.6) que não é bem definida para $\alpha = \pi/2$ devido à singularidade na relação (4.1), quando $\alpha = \pi/2$. De fato, estas relações são válidas apenas para $\alpha < \pi/2$. Quando $\alpha = \pi/2$ a expressão que deve ser utilizada para fornecer o valor correto da corrente induzida é (4.5).

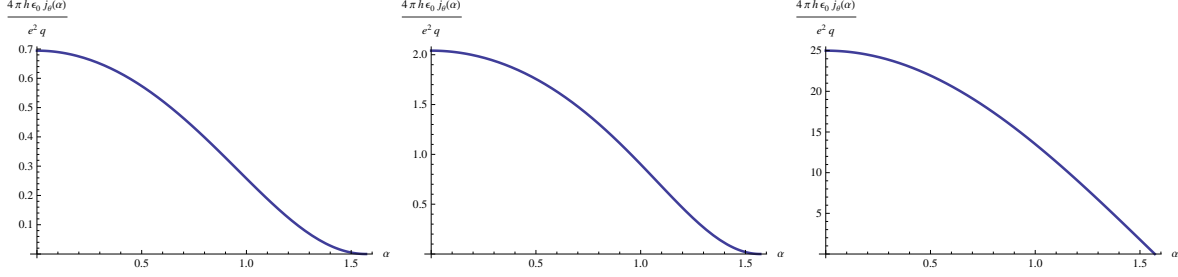


Figura 4.3: Corrente Hall induzida no cone em função do ângulo de abertura α do cone, medido em radianos. À esquerda a corrente na base do cone, em $z = 0$, no centro a corrente no meio do cone, $z = 0.5$ e a direita no ápice, $z = 1$. Considerou-se aqui um cone com $z = 1$ e a carga localizada em $(0, 0, 1.2)$.

Em função da coordenada z que varia desde a base do cone $z = 0$ até seu ápice, a corrente Hall se torna maior próximo ao ápice, exceto para cones com ângulo de abertura próximo de $\pi/3$, onde o máximo da corrente ocorre um pouco abaixo do ápice. Um esboço desse comportamento é mostrado na figura 4.4. No caso da corrente Hall induzida por um campo \vec{E} constante (4.3) essa possui o mesmo valor em todos os pontos do cone, e no caso do campo elétrico gerado por uma carga é diferente, pois o campo possui valores diferentes em diferentes pontos do cone.

A carga elétrica é conservada na superfície do IT cônico, então, na presença de um campo elétrico que induz uma corrente Hall existe uma densidade de carga superficial σ relacionada a \vec{j} por meio da equação da continuidade:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = -\frac{e^2}{2h} \vec{\nabla} \cdot (\hat{n} \times \vec{E}), \quad (4.7)$$

utilizando a propriedade $\nabla \cdot (\hat{n} \times \vec{E}) = \hat{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E})$ e a lei de Faraday da indução esta relação pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \frac{e^2}{2h} \hat{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\frac{e^2}{2h} \hat{n} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (4.8)$$

de onde obtêm-se:

$$\sigma = -\frac{e^2}{2h} \hat{n} \cdot \vec{B}, \quad (4.9)$$

onde \vec{B} é o campo magnético associado com a corrente Hall superficial (4.6).

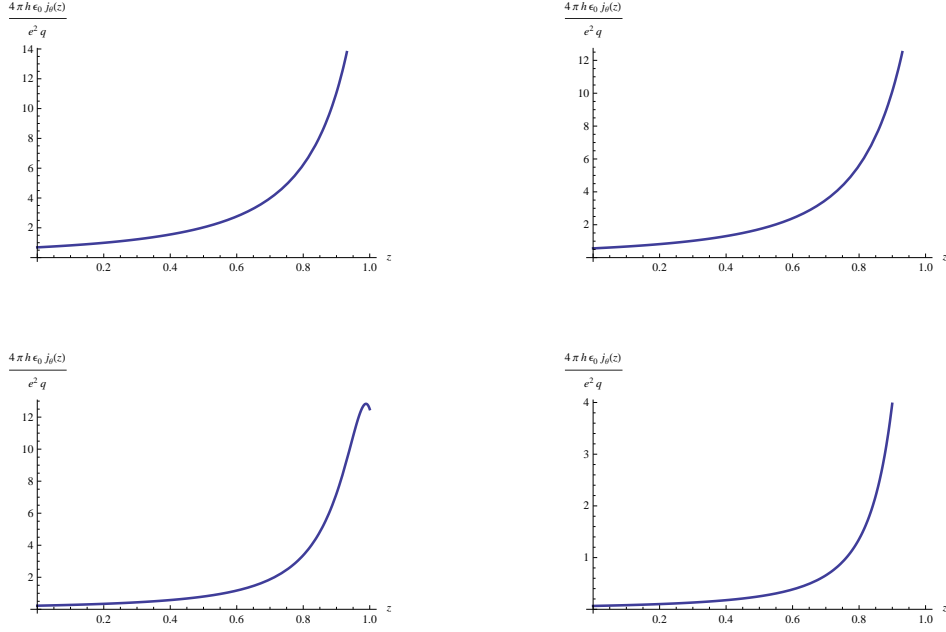


Figura 4.4: Corrente Hall induzida no cone em função da distância z medida ao longo de eixo de simetria desde a base do cone $z = 0$ até seu ápice $z = 1$. Diferentes ângulos de abertura α do cone são considerados. Da esquerda para a direita têm-se $\alpha = 6^\circ$, 30° , 60° e 75° . Apenas para cones com α próximos de 60° o máximo da corrente Hall não ocorre no ápice.

Estas correntes induzidas na superfície do IT são a origem do efeito magnetoeletrico topológico, assim surge a questão: qual a configuração de campo magnético gerada por essas correntes e pode-se descrever tais campos por meio de fontes elementares do campo \vec{B} como monopolos, dipolos ou linhas de cargas magnéticas? No trabalho [17] foi mostrado que no caso da interface plana e esférica de um IT esse campo topológico \vec{B} era descrito por um monopolo e uma linha de cargas magnéticas, respectivamente.

Aqui, no caso cônico, a situação é semelhante à esfera e esperamos que essas correntes induzidas possam ser descritas por uma linha de cargas magnéticas que se estende ao longo do eixo do cone. Posteriormente vamos discutir a obtenção dos campos e cargas imagem no cone, sendo este um problema que ainda está em aberto. Vamos agora considerar um efeito de origem geométrica que existe em um cone e que pode possibilitar um teste da teoria de Einstein da gravitação em (2+1) dimensões.

4.2 Efeito magnetoelétrico topológico e gravitação

Um IT cônico possibilita verificar algumas previsões da teoria de Einstein da gravitação em (2+1) dimensões, pois a dinâmica dos portadores de carga na superfície do IT cônico é idêntica àquela de férmions sem massa no campo gravitacional gerado por uma massa puntiforme estática em (2+1) dimensões.

Quando se considera um isolante topológico curvo é conveniente acoplar os graus de liberdade orbitais dos portadores de carga à curvatura da mesma maneira que o spin real das partículas de Dirac fazem em física de altas energias [130], isto porque o spin dos portadores $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ superficiais está contido na superfície, não enxergando a dimensão perpendicular à superfície [130]. Dessa forma, a própria geometria do espaço já é responsável por uma mudança na estrutura eletrônica do material, mas no caso do cone isso só ocorre no seu ápice, pois ele é livre de torção e curvatura em todos os pontos fora do ápice, porém, podem existir efeitos globais associados à singularidade do ápice.

O IT cônico permite investigar outros efeitos associados a sua geometria. Por exemplo, quando um portador de carga dá uma volta completa em torno do ápice do cone a função de onda muda de sinal, pois elétrons adquirem uma fase de Berry de π quando seu spin é rodado por 2π . Porém, no cone a função de onda dos férmions adquire uma diferença de fase devido a geometria do espaço, assim os portadores na superfície do IT cônico ganham além de uma mudança de fase de Berry, outra mudança devido a geometria do espaço. Esse efeito é chamado de Aharonov-Bohm gravitacional, pois sua previsão foi feita para férmions se movendo em um espaço-tempo de (2 + 1) dimensões na presença do campo gravitacional gerado por uma massa puntiforme [124] (veja também o apêndice C).

Dessa forma, com um IT cônico, pode-se estudar propriedades de férmions de Dirac com massa nula em um espaço que é localmente descrito pela métrica de Minkowski, mas que possui efeitos globais não triviais que devem afetar as propriedades eletrônicas dos portadores superficiais.

Como uma primeira discussão sobre isto, consideremos o efeito que o transporte paralelo da função de onda em torno do ápice causa nos espinores de Dirac que resulta no efeito Aharonov-Bohm gravitacional mencionado anteriormente. Este fenômeno pode ser

usado para se testar a teoria da Relatividade Geral em duas dimensões espaciais. No caso de um IT cônico, bem como no Grafeno, o termo gravitacional $4GM$ deve ser substituído pelo símbolo β que determina o déficit de ângulo igual a $2\pi\beta$, (veja a figura 4.1). A idéia é verificar qual a influência que a geometria cônica pode trazer na dinâmica dos portadores e na estrutura eletrônica do IT considerando que a dinâmica dos portadores em um IT cônico é idêntica àquela de férmions se movendo em um espaço-tempo com $2+1$ dimensões na presença de uma massa puntiforme M .

A primeira análise nesta direção é examinar os efeitos de transporte paralelo ao redor do ápice do cone na função de onda dos portadores. Estes efeitos podem ser obtidos por integrar as equações de transporte paralelo [124]. Assim, os portadores superficiais quando dão uma volta completa em torno do ápice experimentam uma mudança de fase na função de onda devido a geometria do espaço dada por [124] (detalhes no apêndice C):

$$\psi(2\pi) = [\cos(\beta\pi) - i\sigma^z \sin(\beta\pi)]\psi(0). \quad (4.10)$$

Aqui e nas equações que aparecem abaixo é considerada a métrica (C.12), onde a variável angular possui todo o alcance $0 \leq \theta < 2\pi$. Em termos das componentes do espinor essa mudança fica:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(2\pi) \\ \psi_2(2\pi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(-i\pi \sin \alpha) & 0 \\ 0 & \exp(i\pi \sin \alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Por exemplo, se $|\psi(0)\rangle$ é um estado que é descrito por uma mistura de componentes *up* e *down* do espinor:

$$|\psi(0)\rangle = p|+\rangle + q|-\rangle, \quad (4.12)$$

p e q são constantes, então:

$$|\psi(2\pi)\rangle = pe^{-i\pi \sin \alpha}|+\rangle + qe^{i\pi \sin \alpha}|-\rangle \quad (4.13)$$

e, portanto, depois do contorno completo em torno do ápice as componentes *up* e *down* do espinor estão fora de fase por $2\pi \sin \alpha = 2\pi(1 - \beta)$, que é exatamente o ângulo que resta no espaço Euclidiano para os portadores se moverem. Observe que a diferença de fase entre as componentes do espinor se anulam quando o espaço é plano, $\alpha = \pi/2$ ($\eta = 1$). Por outro

lado se $\alpha \neq 0$, a componente *up* do espinor terá uma fase diferente da componente *down*. Este efeito pode manifestar-se por meio de flutuações na concentração de portadores de carga, que altera várias propriedades físicas e de transporte do IT. Assim, se for possível medir esta mudança de fase entre as componentes do espinor ou seu efeito nas propriedades de transporte dos portadores de carga, este sistema pode fornecer um lugar interessante para se testar algumas previsões da teoria da gravitação de Einstein em duas dimensões espaciais. Testes semelhantes a estes podem ser feitos também com grafeno [50, 27, 131].

Os efeitos preditos acima para a função de onda em um IT cônico podem ser mais facilmente detectados na corrente Hall induzida na superfície do IT quando uma carga está próxima ao ápice, como discutido anteriormente. Quando o vetor \vec{j} é transportado paralelamente ao redor do ápice do cone suas componentes mudam, existindo uma mistura entre as componentes espaciais do vetor. A mudança nas componentes da densidade de corrente são dadas por [124] (veja também o Apêndice C):

$$\begin{pmatrix} j_r(2\pi) \\ j_\theta(2\pi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\gamma) & \frac{1}{r_0\alpha} \sin(2\gamma) \\ -r\alpha \sin(2\pi\gamma) & \frac{r}{r_0} \cos(2\pi\gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_r(0) \\ j_\theta(0) \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

onde as condições iniciais para se chegar a este resultado são $\theta = 0$ quando $r = r_0$. r e θ são coordenadas polares na superfície plana do cone. $\gamma = \sin \alpha$ está relacionado ao ângulo que a superfície do cone faz com seu eixo de simetria (veja a Fig. 4.1). A corrente Hall induzida por uma carga acima do ápice do cone possui apenas a componente $\hat{\theta}$ em todos os pontos da superfície do cone (4.6), mas a equação (4.14) mostra que quando a corrente circula ao redor do ápice e retorna a mesma posição angular (mesmo ponto onde foi inicialmente criada) adquire uma componente radial \hat{r} não formando um circuito fechado.

Este efeito é uma consequência da topologia do cone (singularidade no ápice) e é predito pela gravitação e pode ser usado para verificar, em uma escala microscópica, algumas previsões da teoria de Einstein da gravitação. Por exemplo, considere a corrente Hall induzida no ponto ($r = r_0$, $\theta = 0$):

$$\vec{j}(r_0, 0) = j_\theta(r_0, 0)\hat{\theta}, \quad (4.15)$$

então, depois que esta corrente inicia seu movimento em torno do ápice desenvolve uma componente radial. Após uma volta completa em torno do mesmo o novo vetor densidade

de corrente será dado por:

$$\vec{j}(r, 2\pi) = \frac{\sin(2\pi\gamma)}{r_0\alpha} j_\theta(r_0, 0) \hat{r} + \frac{r \cos(2\pi\gamma)}{r_0} j_\theta(r_0, 0) \hat{\theta}. \quad (4.16)$$

A corrente inicial $j_\theta(r_0, 0)$ criada no ponto r_0 é constante e após uma volta completa adquire uma componente radial que pode ser positiva, negativa ou nula. Quando $\gamma = 1/2$, ($\alpha = 30^\circ$) esta componente torna-se nula e esta situação corresponde a:

$$\gamma = \sin \alpha = 1 - \beta = \frac{1}{2}, \quad (4.17)$$

assim, $\beta = 1/2$, significando que exatamente metade do espaço Euclidiano foi retirado para se construir o cone como mostrado na figura 4.1. Quando $\gamma < 1/2$, ($\alpha < 30^\circ$) a componente radial da corrente é positiva e a corrente circula em torno do cone em um movimento espiralado em direção a base. Se por outro lado $\gamma > 1/2$, ($\alpha > 30^\circ$) a componente radial da corrente é negativa, o que significa que a corrente circula em um movimento espiralado em direção ao ápice. O comportamento das componentes radial e angular da corrente após uma volta em torno do ápice em função do ângulo de abertura de cone é mostrado na figura 4.5.

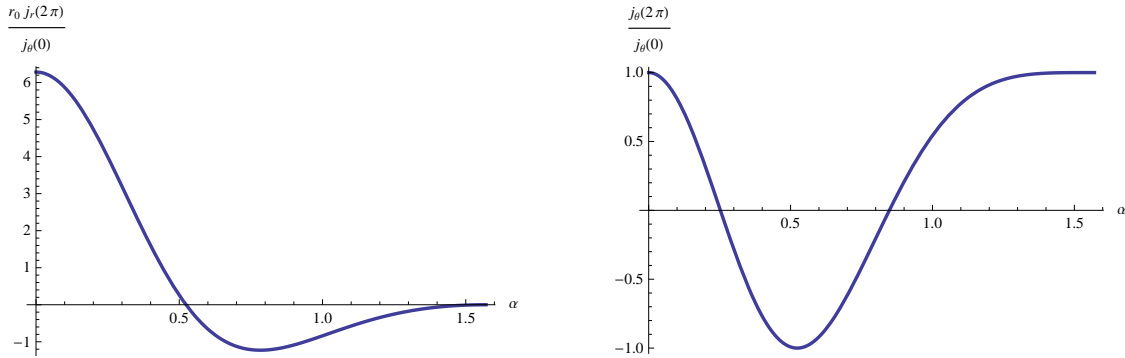


Figura 4.5: Componentes da corrente Hall induzida após transporte paralelo em torno do ápice do cone. Esquerda componente radial da corrente. Note que dependendo do ângulo de abertura do cone esta componente é positiva, negativa ou nula. Direita componente angular da corrente que também muda de sinal dependendo do ângulo de abertura do cone.

Por exemplo considere um cone de IT cujo ângulo de abertura α é menor que $14,5^\circ$ de forma que a componenete $\hat{\theta}$ e \hat{r} da corrente sejam positivas após o transporte paralelo. Neste caso após um tempo longo haverá um acúmulo de carga negativa na base do cone e

de carga positiva em seu ápice, o que corresponde macroscopicamente a uma polarização \vec{P} ao longo do eixo $-\hat{z}$, como mostrado na figura 4.6. Por outro lado se $\alpha > 48,6^\circ$ o sentido da polarização se inverte, pois a componente radial da corrente é negativa e após um tempo longo a polarização é ao longo do eixo $+\hat{z}$ (Fig. 4.6). Dessa forma, pode-se testar a relatividade em duas dimensões espaciais simplesmente verificando-se a direção da polarização elétrica no cone para diversos ângulos de abertura. A determinação desta polarização pode ser feita medindo-se a diferença de potencial entre a base e o ápice do cone.

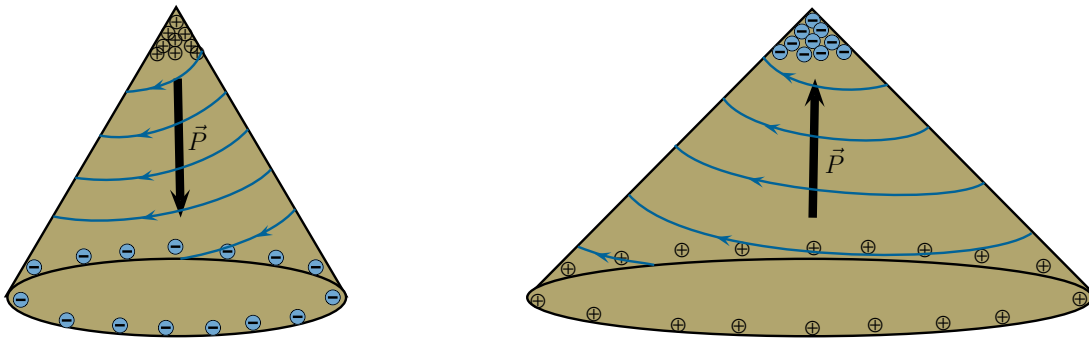


Figura 4.6: Esquema da corrente Hall induzida na superfície do cone quando transportada paralelamente em torno do ápice. Note a inversão da polarização induzida no cone para diferentes ângulos de abertura, $\alpha < 30^\circ$ à esquerda e $\alpha > 30^\circ$ à direita. (Fonte: referência [49].)

Há também uma polarização elétrica e um desvio da corrente na superfície do cone associado com a componente tangencial do campo elétrico na superfície, mas este efeito pode ser eliminado considerando-se um campo elétrico externo normal a superfície do cone e subtraindo da polarização total aquela associada à natureza dielétrica do IT. Alguns resultados semelhantes a estes discutidos aqui já haviam sido obtidos para cones de grafite [50], porém nesse a implementação destes efeitos que necessitam de uma corrente circulante é um pouco mais complexa que no IT, que como discutido acima pode ser facilmente implementada.

4.3 Cargas imagem induzidas no cone

As equações de Maxwell junto com as relações constitutivas (2.34) e (2.35) e as condições de contorno sobre os campos constituem um problema de valor de contorno completo. Para encontrar os campos elétricos e magnéticos em todos os pontos do espaço podemos usar o bem conhecido método das imagens e determinar, por exemplo, qual a carga imagem associada ao campo magnético topológico criado pela corrente induzida. Esse método é útil em problemas onde existem cargas na presença de superfícies de contorno. O método se baseia na idéia de se obter da geometria da situação um conjunto de cargas com determinadas intensidades apropriadas ao problema e colocadas fora da região de interesse, que simulem (reproduzam) as condições de contorno do problema original. Estas cargas auxiliares são chamadas de cargas imagem e o método que troca o contorno por uma região maior e com cargas imagens é chamado método das imagens [132]. Vamos utilizar esse método bem conhecido para calcular potenciais, campos e cargas imagem no problema do cone com uma carga próxima a seu ápice. A região de interesse aqui é aquela externa ao cone de forma que as imagens devem estar todas localizadas no interior do cone.

Tanto fora do cone como em seu interior, o rotacional e a divergência de ambos os campos se anulam (exceto em $z = d$) e assim podemos escrever os campos como gradientes de funções escalares [132]:

$$\vec{E}^{(i)} = -\nabla\Phi_E^{(i)}, \quad (4.18)$$

$$\vec{B}^{(i)} = -\nabla\Phi_M^{(i)}, \quad (4.19)$$

onde $i = 1, 2$ refere-se as regiões fora do cone e no interior do cone respectivamente. Como este problema possui simetria polar é conveniente expandir os potenciais em termos de Harmônicos esféricos [132]. Considere o cone localizado na região $z < 0$, estando seu ápice na origem e o eixo z sendo seu eixo de simetria. A figura 4.7 mostra os detalhes da geometria do problema. O potencial produzido pela carga puntiforme q localizada em $(0, 0, d)$ no ponto (r, θ, ϕ) é dado por [132]:

$$\Phi(x) = \frac{q}{4\pi\epsilon_1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos\theta), \quad (4.20)$$

onde $r_<$ ($r_>$) é a menor (maior) das distâncias d e r . $P_l(\cos \theta)$ é o polinômio de Legendre de ordem l e θ é o ângulo entre o eixo $+z$ e o vetor posição \vec{r} do ponto onde se deseja obter o potencial.

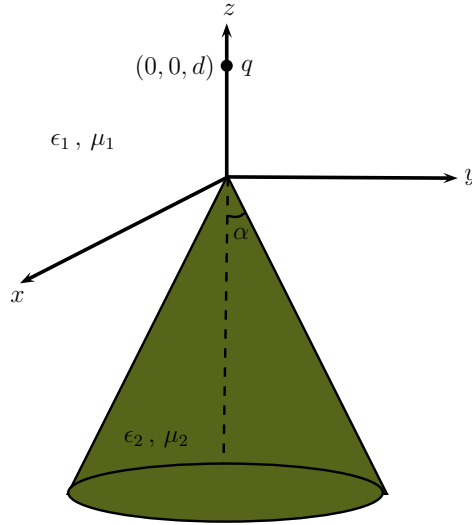


Figura 4.7: Ilustração da geometria considerada para se calcular os campos e cargas imagem. O IT cônico possui permissividade elétrica ϵ_2 e permeabilidade magnética μ_2 e o espaço em torno do cone é ocupado por uma dielétrico de constantes ϵ_1 e μ_1 .

Considerando que o cone é um IT com permissividade elétrica ϵ_2 e permeabilidade magnética μ_2 , o espaço em torno desse é um dielétrico com permissividade e permeabilidade dadas por ϵ_1 e μ_1 , respectivamente. As relações constitutivas entre os campos no contorno do material são dadas pelas relações (2.34) e (2.35). As condições de contorno sobre os campos, quando escritas em termos dos potenciais permitem determinar as constantes A_l , B_l , C_l e D_l . Considere primeiro as condições de contorno sobre a componente normal do deslocamento elétrico:

$$(\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \cdot \hat{n} = \sigma. \quad (4.21)$$

sendo \hat{n} um vetor normal a superfície do cone dado em coordenadas esféricas por:

$$\hat{n} = \sin(\alpha + \theta)\hat{r} + \cos(\alpha + \theta)\hat{\theta}. \quad (4.22)$$

Note que se $\alpha = \pi/2$ então $\hat{n} = \hat{z}$. O interior do cone é dado pelos pontos $0 \leq r < \infty$, $\pi - \alpha \leq \theta < \pi$, $0 < \phi \leq 2\pi$ e a superfície é identificada por $(r, \theta = \pi - \alpha, \phi)$. Na

superfície do cone, onde as condições de contorno são aplicadas:

$$\hat{n} = -\hat{\theta}. \quad (4.23)$$

Em termos dos potenciais a condição de contorno (4.21) se torna:

$$\epsilon_1 \frac{\partial \Phi_E^{(1)}(r, \pi - \alpha)}{\partial \theta} = \epsilon_2 \frac{\partial \Phi_E^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial \theta} - \alpha c \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_M^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial \theta}. \quad (4.24)$$

onde a relação:

$$\frac{\partial \Phi(x)}{\partial n} = \vec{\nabla} \Phi(x) \cdot \hat{n}, \quad (4.25)$$

e a relação (4.9) foram utilizadas. A componente normal do vetor \vec{B} é contínua através da interface, levando a condição:

$$(\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \hat{n} = 0, \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial \Phi_M^{(1)}(r, \pi - \alpha)}{\partial \theta} = \frac{\partial \Phi_M^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial \theta}. \quad (4.27)$$

As demais condições de contorno são sobre as componentes tangenciais dos campos. Para o campo \vec{H} são dadas por:

$$\hat{n} \times (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) = \vec{j}, \quad (4.28)$$

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \Phi_M^{(1)}(r, \pi - \alpha)}{\partial r} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \Phi_M^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial r} + \alpha c \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_E^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial r}. \quad (4.29)$$

E para a componente tangencial do campo elétrico:

$$\hat{n} \times (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) = 0. \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \Phi_E^{(1)}(r, \pi - \alpha)}{\partial r} = \frac{\partial \Phi_E^{(2)}(r, \pi - \alpha)}{\partial r}. \quad (4.31)$$

Vamos considerar $d < r$ de forma que as expressões e relações obtidas a partir deste ponto não são válidas no ápice do cone, mas pontos próximos a este podem sempre ser considerados, tomando-se d cada vez menor de forma que r possa sempre ser menor e mais próximo ao ápice. Os potenciais elétricos e magnéticos na região 1, fora do cone são escritos como:

$$\Phi_E^{(1)}(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{d^l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta), \quad (4.32)$$

$$\Phi_M^{(1)}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta). \quad (4.33)$$

Na expressão do potencial elétrico o primeiro termo corresponde ao potencial produzido pela carga puntiforme q que se localiza em $(0, 0, d)$ e o segundo termo é devido a cargas de polarização (4.9) na superfície do cone. Nestas expressões considera-se que o ponto de observação r é maior que todas as demais distâncias do problema, caso contrário estas expansões podem divergir. Na região fora do cone esta condição é facilmente obtida. Porém, no interior do cone para um dado ponto r existem cargas de polarização e correntes que contribuem para os potenciais que se encontram a distâncias maiores e menores de r . Assim as expansões do potencial nesta região devem ser da forma:

$$\Phi_E^{(2)}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(C_l r^l + \frac{D_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta). \quad (4.34)$$

$$\Phi_M^{(2)}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(E_l r^l + \frac{F_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta). \quad (4.35)$$

As equações (4.24), (4.27), (4.29) e (4.31) junto com as expansões (4.32), (4.33), (4.34) e (4.35) não permitem determinar todas as constantes A_l , B_l , C_l , D_l , E_l e F_l . Parece que este é um problema inconsistente para se resolver, pelo menos dessa forma. Este é um problema que ainda está em aberto e esperamos em breve obter uma resposta satisfatória a estas questões.

Capítulo 5

Isolantes Topológicos com domínios magnéticos na superfície

Neste capítulo continua-se a discussão dos resultados obtidos no estudo dos IT. A superfície de um IT é um lugar excepcional para se estudar a física de férmions de Dirac em $(2+1)$ dimensões devido a robusteza de seus estados. No grafeno, por exemplo, existem dois pontos de Dirac que podem ser distorcidos por tensões, impurezas ou defeitos na rede. Já em IT que possui um número ímpar de pontos de Dirac, apenas perturbações que violam a simetria de Reversão Temporal como impurezas magnéticas no material é que podem distorcer os pontos de Dirac, por exemplo, abrindo um *gap* de energia. Alguns trabalhos, como a referência [16], também mostram que a presença de perturbações que quebram a simetria de Reversão Temporal na superfície constituem a forma mais natural de revelar as propriedades topológicas desses férmions.

Quando a superfície do IT é coberta por um filme magnético um *gap* se abre para os estados da superfície e se o nível de Fermi se encontra no *gap* o material é isolante no *bulk* e na superfície. A maneira mais natural para se fazer isto é com um filme cuja magnetização é perpendicular à superfície do IT [44, 47, 133]. Os efeitos deste tipo de magnetização na superfície dos IT tem sido bem estudados nos últimos anos [44, 45, 46, 47, 48, 133].

Uma situação peculiar e diferente das anteriormente discutidas na literatura surge quando a superfície do IT é coberta por um filme magnético com uma magnetização de

plano fácil, paralela a superfície do IT. Embora neste caso a simetria de Reversão Temporal também seja quebrada na superfície do material, os estados de superfície não adquirem uma massa diretamente, como no caso da magnetização perpendicular a superfície e os estados de borda não são mais robustos. Aqui discute-se o caso em que a magnetização possui uma configuração do tipo-vórtice. Neste existe um acoplamento entre o momento angular dos portadores de carga com o momento magnético da impureza, acoplamento este que leva a possibilidade de estados ligados, espalhados e modos com energia nula na superfície do IT [49].

Vamos considerar o caso mais simples de um único cone de Dirac na superfície do IT como ocorre em Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 ou Sb_2Te_3 . Considere a superfície do IT 3D no plano $x-y$ e o *bulk* do material na região $z < 0$. A Hamiltoniana efetiva que descreve os estados da superfície neste caso é:

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (5.1)$$

sendo:

$$H_0 = \hbar v_F \vec{k} \cdot \vec{\sigma} = \hbar v_F (k_x \sigma^x + k_y \sigma^y), \quad (5.2)$$

$$H_{int} = -J \vec{M}'(\vec{r}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (5.3)$$

Aqui $\vec{\sigma}$ está associado com o spin dos elétrons da superfície $\vec{s}(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \psi(\vec{r})$ que interage com o momento magnético $\vec{M}'(\vec{r})$ do filme magnético que cobre a superfície do IT¹ por meio de uma interação de troca de curto alcance. J é uma constante de acoplamento que determina a natureza do acoplamento, ferromagnético ($J > 0$) ou antiferromagnético ($J < 0$). Esta constante não será escrita explicitamente e será incorporada na definição da magnetização com $\vec{M} = -J \vec{M}'$.

Considerando Sb_2Te_3 como um exemplo, pois ele pode ser dopado com vanádio, que é magnético [44], o modelo efetivo (5.2) descreve bem este material com $\hbar v_F \approx 3.7 eV \cdot \text{Å}$ e o acoplamento de troca entre os elétrons da superfície e a impureza magnética são da

¹Na literatura dos IT é comum chamar filmes magnéticos na superfície do IT de impurezas que cobrem a superfície, e vamos manter esta nomenclatura.

ordem de $0.1 - 0.5\text{eV}$, dependendo da sobreposição das funções de onda que descrevem os estados superficiais e essa impureza.

A Hamiltoniana acima, (5.1) descreve o problema de impurezas magnéticas na superfície de um IT. Ela será o ponto de partida para nossa análise. Considere uma configuração tipo-vórtice, que é uma configuração bidimensional de momentos magnéticos que giram em torno de um centro comum, veja a figura 5.1, que mostra uma visão superior da superfície do IT e da configuração magnética na superfície. Um vórtice pode desenvolver componentes de spin que próximas ao núcleo apontam para fora do plano (*out of plane*). Estas componentes podem modificar a situação discutida abaixo, pois uma componente da magnetização perpendicular ao plano do IT geraria um *gap* de massa para os portadores. Os efeitos de impurezas magnéticas com magnetização perpendicular a superfície são bem entendidos [44] e não vamos discutir esta possibilidade.

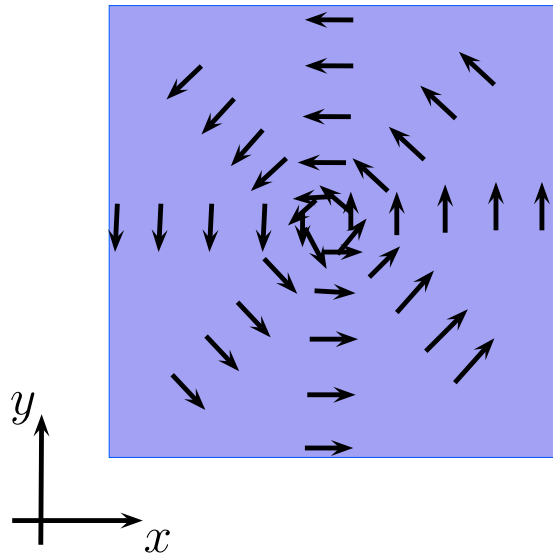


Figura 5.1: Esquema da magnetização tipo-vórtice na superfície do isolante topológico no plano $x - y$. O *bulk* do IT encontra-se na região $z < 0$. (Fonte: referência [43].)

Uma magnetização $\vec{M}(\vec{r})$ tipo-vórtice constante em módulo mas girando em torno de um núcleo ou centro pode ser escrita em coordenadas polares (r, θ) na forma:

$$\vec{M} = M\hat{\theta}, \quad (5.4)$$

e a Hamiltoniana (5.1) em coordenadas polares na forma matricial torna-se²:

$$H = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{M}{\hbar v_F} \right) \\ e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{M}{\hbar v_F} \right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Para resolver o problema de autovalores $H\psi = E\psi$ e obter as autofunções e o espectro de energia dos portadores vamos explorar a simetria do problema e escrever o espinor na forma:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} A(\vec{r}) \\ B(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{im\theta} f(r) \\ e^{i(m+1)\theta} g(r) \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

sendo que as componentes do espinor $f(r)$ e $g(r)$ satisfazem a equações diferenciais ordinárias acopladas dadas por:

$$i \left(\frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r} + \frac{M}{\hbar v_F} \right) g(r) = \frac{E}{\hbar v_F} f(r), \quad (5.7)$$

$$i \left(\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} - \frac{M}{\hbar v_F} \right) f(r) = \frac{E}{\hbar v_F} g(r), \quad (5.8)$$

que podem ser reduzidas a uma única equação diferencial ordinária de segunda ordem para cada uma das componentes:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{M}{\hbar v_F} \frac{2m+1}{r} + \frac{E^2 - M^2}{\hbar^2 v_F^2} \right] f(r) = 0. \quad (5.9)$$

A componente $g(r)$ do espinor satisfaz a uma EDO semelhante a esta, com a única diferença no termo $\frac{m^2}{r^2}$ que no caso de $g(r)$ deve ser trocado por $\frac{(m+1)^2}{r^2}$. Porém, uma vez encontrada a função $f(r)$ a outra componente do espinor pode facilmente ser obtida por meio da equação (5.8), que estabelece um vínculo entre as componentes do espinor. A equação (5.9) possui solução analítica em termos de funções hipergeométricas confluentes [134], e aparece em outros contextos de física sendo idêntica, por exemplo, à parte radial da equação de Schrödinger para um átomo de Hidrogênio bidimensional [134].

As autofunções e autovalores podem ser obtidos por simplesmente mapear um problema no outro. No caso do átomo de hidrogênio bidimensional, onde a dinâmica do

²Para se chegar a esta forma basta escrever os vetores unitários $(\hat{r}, \hat{\theta})$ em termos dos cartesianos (\hat{x}, \hat{y}) e escrever os produtos: $\vec{\sigma} \cdot \hat{r} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}$ e $\vec{\sigma} \cdot \hat{\theta} = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\theta} \\ ie^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}$.

elétron é restrita a um plano mas os campos são tridimensionais os estados ligados ($E < 0$) possuem autoenergias dadas por [134]:

$$E_n = -\frac{Z^2}{2(n - 1/2)^2} \frac{m_e e^4}{\hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.10)$$

sendo Z o número atômico e n um número quântico. Para mapear um problema no outro basta fazer a identificação:

$$\frac{2m_e E_{H_2}}{\hbar^2} \longleftrightarrow \frac{E^2 - M^2}{\hbar^2 v_F^2}, \quad \frac{2m_e Z e^2}{\hbar^2} \longleftrightarrow \frac{M(2m + 1)}{\hbar v_F}. \quad (5.11)$$

As quantidades do lado esquerdo se referem ao problema do átomo de hidrogênio e as do lado direito ao IT. Existe a possibilidade de estados ligados com autovalores discretos que possuem $E < 0$ e estados espalhados contínuos com $E > 0$ no IT. Para o caso dos estados ligados, as autoenergias dos portadores de carga são então dadas por:

$$E^2(n, m) = M^2 \left[1 - \frac{(m + 1/2)^2}{(n + |m| + 1/2)^2} \right], \quad (5.12)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, inteiro, e $|m| = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Considerando $M > 0$ resultados numéricos [135] mostram que quando $2m + 1 > 0$ existem estados ligados para $|E| < M$, com espectro discreto de energia e para $2m + 1 < 0$ não existem estados ligados. Para este último caso ($2m + 1 < 0$) é como se o vórtice repelisse os estados superficiais, mas o espectro ainda é discreto. Esta conclusão também pode ser obtida das funções de onda do problema, pois se $2m + 1 < 0$ as autofunções não são normalizáveis, o que leva a estados fisicamente inaceitáveis.

As autofunções radiais dos espinores podem ser dadas em termos das funções hiper-geométricas. Para os estados ligados algumas autofunções radiais são:

$$f_{10}(r) = \beta_{10} e^{-\beta_{10} r/2}, \quad (5.13)$$

$$f_{20}(r) = \frac{\beta_{20}}{\sqrt{3}} (1 - \beta_{20} r) e^{-\beta_{20} r/2}, \quad (5.14)$$

$$f_{21}(r) = \frac{\beta_{21}^2}{\sqrt{6}} r e^{-\beta_{21} r/2}. \quad (5.15)$$

$$f_{30}(r) = \frac{\beta_{30}^2}{2\sqrt{5}}(2 - 4\beta_{30}r + \beta_{30}^2 r^2)e^{-\beta_{21}r/2}. \quad (5.16)$$

sendo $\beta_{nm} = \frac{M}{n-1/2} \frac{2m+1}{\hbar v_F}$. As autofunções $g(r)$ podem ser obtidas por meio da equação (5.8). Na figura 5.2 são mostrados esboços dos gráficos das quatro primeiras autofunções $f_{nm}(r)$.

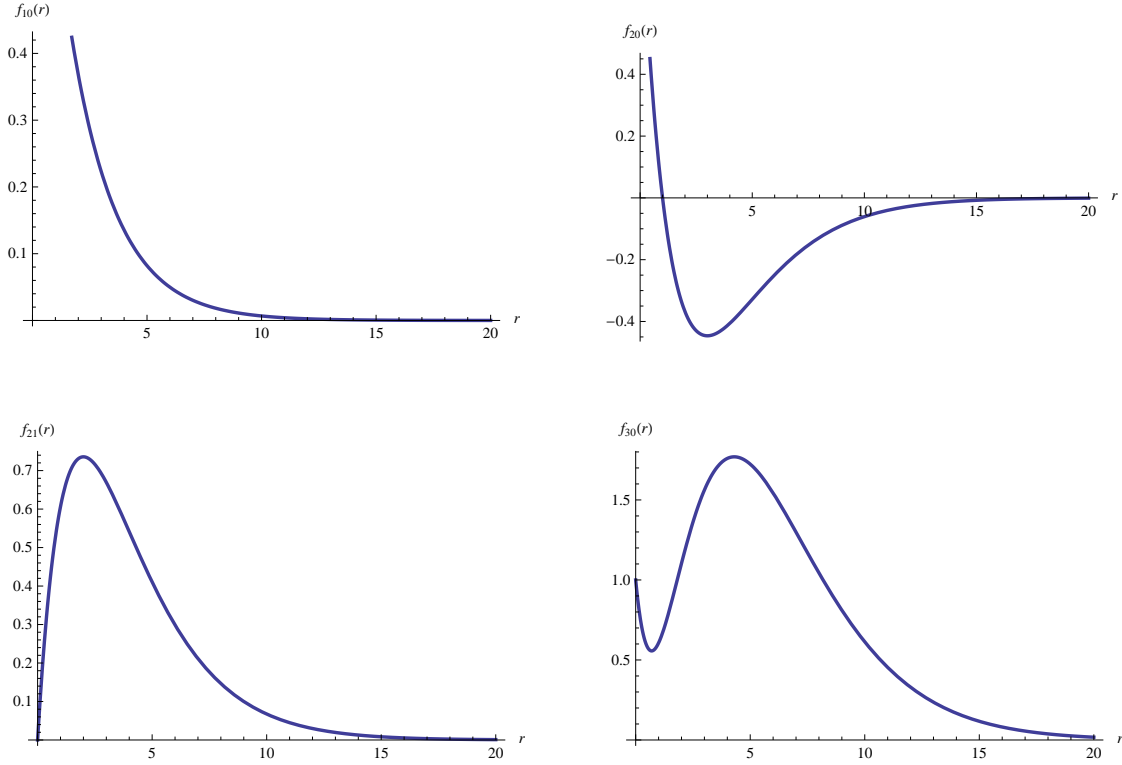


Figura 5.2: Esboço das quatro primeiras autofunções para a componente up do spin dos portadores de carga ligados pelo vórtice na superfície do IT. Unidades e escalas arbitrárias. (Fonte: referência [49].)

Todas as autofunções que descrevem estados ligados decaem exponencialmente. Estas autofunções radiais são semelhantes aos polinômios de Laguerre que descrevem o átomo de hidrogênio tridimensional, possuindo apenas alguns coeficientes diferentes. Uma expressão geral para qualquer $f_{nm}(r)$ pode ser obtida em termos da função hipergeométrica confluyente [134].

Os estados espalhados com $E > 0$ também podem ser obtidos mapeando o problema, aqui considerado no átomo de hidrogênio bidimensional e pode-se obter, por exemplo, as

autofunções e os desvios de fase devido ao espalhamento. As autofunções radiais para os portadores com spin up são dadas por:

$$f_{km}(r) = c_{km}(2k\beta r)^{|m|} \exp(-ik\beta r) \times {}_1F_1(i/k + |m| + 1/2, 2|m| + 1, i2k\beta r). \quad (5.17)$$

As constantes c_{km} são determinadas pela condição de normalização da função de onda, ${}_1F_1$ é a função hipergeométrica confluyente e as quantidades k e β são dadas por:

$$k = \sqrt{\frac{E^2 - M^2}{M^2(m + 1/2)^2}}, \quad \beta = \frac{M(m + 1/2)}{\hbar v_F}, \quad (5.18)$$

sendo que para que existam estados espalhados k deve ser real, o que implica que $E > |M|$. Os portadores de carga devem então possuir uma energia maior que o módulo do momento magnético do vórtice.

Após a obtenção de alguns dos resultados discutidos acima foi encontrada na literatura a referência [135] que traz resultados semelhantes, porém nessa o foco dos autores está na possibilidade de induzir campos de calibre na superfície do IT, devido a efeitos externos induzidos por vórtices e *skyrmions* acoplados a mesma. Os autores também argumentam que um vórtice na superfície do IT, como o discutido aqui, induz um campo de calibre na dinâmica dos portadores. Sendo assim, é como se não existisse um vórtice na superfície do IT e os portadores de carga sentissem a presença de um campo externo, cujo potencial vetor está relacionado ao momento magnético do vórtice [135]. Essa descrição é equivalente a apresentada nesta Tese, apesar de possuir um foco diferente. Mais detalhes podem ser obtidos na referência [135].

Uma magnetização tipo vórtice cobrindo a superfície do IT possibilita a existência de modos com energia nula que são spin polarizados, estando a polarização destes estados associada ao sentido de rotação da magnetização que cobre a superfície, ou equivalentemente ao sinal da constante de acoplamento J . Estes estados são obtidos da solução do problema de autovalor:

$$H\psi = 0. \quad (5.19)$$

No caso de onde $M = -JM' > 0$ as autofunções dos modos com energia nula são:

$$\psi(\vec{r}) = ae^{i(m+1)\theta} \frac{e^{-(M/\hbar v_F)r}}{r^{m+1}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E = 0, \quad (5.20)$$

sendo $2m + 1 < 0$ para que as funções de onda possam ser normalizáveis (físicas). A constantes de normalização é dada por:

$$a = a(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(|2m + 1|!)}} \left(\frac{2M}{\hbar v_F} \right)^{|m+1/2|+1/2} \quad (5.21)$$

Note que os modos com energia nula possuem *spin* $-\frac{1}{2}$. Caso o acoplamento J seja ferromagnético ($J < 0$) o sentido da magnetização se inverte e os modos com energia nula terão *spin* $\frac{1}{2}$. Em todos os casos a carga destes estados com energia nula é um múltiplo da carga eletrônica:

$$Q = \int d^2r j^0 = \int d^2r \psi^\dagger \psi = 1. \quad (5.22)$$

Interessante o fato de que se o filme magnético que cobre a superfície for finito, não se estendendo até o infinito como considerado acima, não existem modos com energia nula.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

Vimos ao longo desta tese que Grafeno e Isolantes Topológicos são novos materiais que unem várias áreas da física e da matemática na descrição e compreensão de suas propriedades. O estudo de tais materiais permite, por exemplo, uma conexão entre FMC, QED planar, Gravitação e Topologia. Nos últimos anos estes materiais tem atraído muito a atenção devido a suas propriedades distintas, sendo uma delas a descrição unificada dos dois por meio da equação de Dirac em $(2+1)$ dimensões. Vimos que o espalhamento dos portadores de carga no grafeno devido a defeitos topológicos como buracos, pentágonos e heptágonos elucidam algumas propriedades do mesmo, como a sua alta mobilidade, que não depende de defeitos na rede como buracos. Em todos os casos os desvios de fase da função de onda dos portadores foram calculados e no caso de buracos na rede do grafeno detectou-se que tais defeitos não dão contribuição para a resistividade do material.

Quando ocorrem defeitos pentagonais ou hexagonais na rede os portadores são espalhados por um ângulo que depende apenas do número de defeitos e do momento angular dos portadores. Desvios de trajetória na corrente devido a esses defeitos podem ser detectadas por meio de um experimento de interferência como o de Young. Talvez estes efeitos podem ser utilizados para construir canais de corrente no grafeno em futuras aplicações.

Outro ponto de vista de nossos resultados sobre grafeno é que este material permite explorar relatividade geral em duas dimensões espaciais, uma vez que alguns dos efeitos discutidos aqui são preditos por esta teoria [50, 107, 124, 125] e utilizamos uma analogia entre o movimento dos portadores de carga em uma folha de grafeno cônica e aquele de

férmions, no campo gravitacional de uma massa puntiforme em (2+1) dimensões.

No caso dos Isolantes Topológicos consideramos um IT com um formato cônico. Neste caso a dinâmica dos portadores difere daquela do material com uma superfície plana, pois existem efeitos globais associados ao *manifold* onde os elétrons se movem. A corrente Hall induzida na superfície do cone por uma carga puntiforme próxima ao seu ápice foi obtida e algumas de suas propriedades discutidas. Vimos que quando os portadores dão uma volta completa em torno do ápice adquirem além de uma fase de Berry de π , uma fase de origem geométrica (ou gravitacional) associada ao déficit de ângulo do cone. Tanto a corrente quanto a função de onda sofrem este efeito, que só ocorre devido a geometria do IT e devido ao fato dos portadores serem partículas de Dirac que se movem em um espaço bidimensional. Este efeito da geometria do espaço na dinâmica dos portadores, predito pela gravitação pode ser utilizado para se testar a Relatividade Geral de Einstein em um sistema de matéria condensada de fácil realização como o IT [49].

Quando a superfície do IT é coberta por um filme magnético com uma magnetização de plano fácil formando um vórtice, a dinâmica dos portadores é drasticamente alterada, pois existem estados eletrônicos ligados e espalhados na superfície, dependendo do momento angular e energia dos portadores. Este tipo de configuração não gera um *gap* de massa como no caso de uma magnetização perpendicular ao plano, apesar de também violar a simetria de Reversão Temporal, mas sim um acoplamento entre a magnetização do filme que cobre a superfície e o momento angular dos portadores de carga que se movem na mesma. Este tipo de magnetização também possibilita a existência de modos com energia nula na superfície do IT que são spin polarizados.

Como perspectivas de continuação do trabalho apresentado nesta tese mencionamos o cálculo das cargas imagem no problema de uma carga puntiforme próxima ao ápice do cone, discutido no Capítulo 4. Para tal esperamos encontrar uma distribuição de cargas imagem que se comportam como multipolos de ordem fracional, como ocorre em um cone condutor [136]. Isto ocorre devido ao déficit de ângulo existente no espaço. Devido a existência do efeito magnetoelétrico topológico esperamos também obter como carga imagem não apenas cargas elétricas, mas uma distribuição de cargas elétricas e magnéticas

para que possam dar conta das condições de contorno, como ocorre, por exemplo em uma esfera [17].

Outra questão refere-se ao IT com um filme magnético com magnetização tipo-vórtice, discutido no Capítulo 5. Quantidades observáveis ou mensuráveis das modificações do espectro eletrônico apresentadas podem também ser obtidas a partir da densidade local de estados eletrônicos (DLEE) na superfície do IT. A DLEE pode ser obtida da função de Green retardada da Hamiltoniana (5.5) por meio do seu traço [137, 138] $N(\vec{r}, E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im Tr } G^R(\vec{r}, \vec{r}'; E)$, sendo o fator 2 devido a degenerescência de spin. Para um IT plano sem defeitos ou impurezas descrito pela Hamiltoniana (5.2), a função de green retardada pode ser obtida analiticamente [138, 139]:

$$G_0^R(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{iE}{4v_F} \left[H_0(E|\vec{r} - \vec{r}'|) + i \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} H_1(E|\vec{r} - \vec{r}'|) \right],$$

sendo H_0 e H_1 as funções de Hankel de ordem zero e primeira ordem, respectivamente. Na presença de potenciais espalhadores a função de Green pode ser expandida perturbativamente [137, 139]:

$$G^R(\vec{r}, \vec{r}'; E) = G_0^R(\vec{r}, \vec{r}'; E) + \int dr' G_0^R(\vec{r}, \vec{r}'; E) M G_0^R(\vec{r}', \vec{r}'; E) + \dots$$

e esperamos avaliar esta função de Green e fazer uma análise da densidade de estados eletrônicos para o IT com uma magnetização tipo-vórtice em sua superfície ainda para o caso dos estados espalhados e ligados.

Questões interessantes surgem ao se pensar um anel (com raio externo e interno finitos) com magnetização tipo-vórtice na superfície do IT. Por exemplo, qual a influência desta magnetização no espectro de energia e seções de espalhamento? Surgem também questões relacionadas ao efeito Hall nas bordas desta configuração uma vez que existe uma parede de domínios magnéticos nas bordas do anel mas a magnetização não é perpendicular e sim paralela a superfície. Será que existem correntes spin polarizadas ao longo destas paredes de domínio como no caso da magnetização perpendicular?

Há ainda questões associadas a propriedades eletromagnéticas dos IT, como a propagação da luz através destes materiais e meios confinantes da radiação feitos de paredes que são IT. E com relação a excitações com spin fracionário (*anyons*) na superfície dos

IT também parecem ter várias questões para serem respondidas e muitas coisas para se explorar, por isso pretende-se também estudar este assunto.

Apêndice A

A equação de Dirac em (2+1) dimensões

Neste apêndice é feita uma breve revisão de férmions em (2 + 1) dimensões com o intuito de fornecer um *background* para os leitores desta tese que não estão familiarizados com este assunto. Destaca-se a importância e peculiaridade da dimensionalidade do espaço-tempo e as principais características da equação de Dirac que são importantes na descrição efetiva do Grafeno e dos estados superficiais dos Isolantes Topológicos.

A.1 Férmions em 2+1 dimensões

A diferença mais óbvia entre férmions em 3 + 1 dimensões e em 2 + 1 aparece no número de componentes do espinor ψ . Em (3 + 1)D o espinor possui quatro componentes que descrevem as duas componentes do spin do elétron (*up* e *down*) e as duas componentes do spin do pósitron, a antipartícula do elétron. A mesma equação descreve tanto partículas como antipartículas, uma peculiaridade de equações de onda relativísticas [33, 140]. Partindo de um ponto mais fundamental a equação de Dirac em (2 + 1)D pode ser obtida da ação:

$$S(\psi, \bar{\psi}) = \int d^3x (i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi), \quad (\text{A.1})$$

sendo a medida da integral dada por $d^3x = dx dy dt$ integrada sobre todo o espaço-tempo. Note que esta ação é idêntica à correspondente em $(3 + 1)D$, sendo a diferença na dimensionalidade das matrizes γ^μ de Dirac. De fato pode-se obter a equação de Dirac em um espaço-tempo com qualquer número de dimensões partindo da ação acima que sempre terá esta forma, diferindo apenas na medida de integração e na dimensionalidade das matrizes γ .

Em qualquer dimensão as matrizes γ^μ de Dirac devem satisfazer a álgebra de Clifford:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad \text{sendo em } (2 + 1)D : \quad \eta^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

$\eta^{\mu\nu}$ é a métrica de Minkowski em $(2 + 1)D$. A dimensão p das matrizes de Dirac é definida de forma não ambígua apenas se o número de dimensões do espaço-tempo D for par, sendo dada por:

$$p = 2^{D/2}. \quad (\text{A.3})$$

Portanto em $(1 + 1)D$ onde $D = 2$ têm-se $p = 2$ e as matrizes γ podem ser representadas pelas matrizes de Pauli. Em $(2 + 1)D$ que é o caso de maior interesse aqui, pode-se usar duas representações alternativas, uma em que as matrizes de Dirac são quadrimencionais e outra onde elas são bidimensionais. Na representação bidimensional uma escolha padrão para as matrizes de Dirac é:

$$\gamma^0 = \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = -i\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

onde σ^i ($i = 1, 2, 3$) são as matrizes de Pauli. As matrizes γ como definidas acima satisfazem a:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = \eta^{\mu\nu} - i\epsilon^{\mu\nu\alpha} \gamma_\alpha. \quad (\text{A.5})$$

Em $(2+1)$ dimensões, utilizando-se as equações de Euler-Lagrange, para o espinor $\bar{\psi}$ a ação (A.1) leva a equação de Dirac [140]:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0. \quad (\text{A.6})$$

Note que existe uma soma de 0 a 2 no índice μ aparecendo na equação acima e $\partial_\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$. Na representação das matrizes de Dirac dadas por (A.4), o espinor possui duas componentes:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad \bar{\psi}(x) = \psi^\dagger \gamma^0 = (\psi_1^*(x), -\psi_2^*(x)). \quad (\text{A.7})$$

Não existe um análogo a γ_5 em 3 dimensões, ou seja, não existem fermions quirais nesse mundo sendo tais objetos restritos a espaço-tempo com um número par de dimensões.

A equação de Dirac (A.6) pode ser escrita em uma forma Hamiltoniana como a equação de Schrödinger. Para isso considere-a escrita na forma:

$$i\gamma^0 \partial_t \psi = -i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \psi + m\psi \quad (\text{A.8})$$

multiplicando-se esta equação pela esquerda por γ^0 e usando o fato que $(\gamma^0)^2 = 1$ obtêm-se:

$$i\partial_t \psi = -i\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \psi + \gamma^0 m\psi \quad (\text{A.9})$$

Definindo dois novos operadores, chamados, em quatro dimensões de operadores de Dirac obtêm-se:

$$\vec{\alpha} \equiv \gamma^0 \vec{\gamma}, \quad \beta \equiv \gamma^0 = \sigma^z \quad (\text{A.10})$$

que satisfazem as relações de anti-comutação:

$$\{\alpha_i, \alpha_k\} = 2\delta_{ik}, \quad \{\alpha_k, \beta\} = 0, \quad \alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \quad (\text{A.11})$$

δ_{ik} assume os valores 0 se $i \neq k$ e 1 se $i = k$. A equação de Dirac assume a forma:

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (\text{A.12})$$

onde a Hamiltoniana possui a forma:

$$H = -i\alpha \cdot \nabla + \beta m. \quad (\text{A.13})$$

Restaurando os fatores \hbar e c a equação de Dirac se escreve na forma Hamiltoniana como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \alpha \cdot \nabla \psi + \beta m c^2 \psi, \quad (\text{A.14})$$

a qual assumindo a dependência temporal do espinor como $\psi(x) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar)$ transforma-se no problema de autovalor usual da mecânica quântica $H\psi = E\psi$. Este formalismo Hamiltoniano é importante para se obter a dinâmica de operadores e obter quantidades conservadas temporalmente. Vamos escrever explicitamente as matrizes α e β em termos das matrizes de Pauli para vermos que esta Hamiltoniana de fato coincide com aquela apresentada no estudo do grafeno e dos isolantes topológicos. Usando a relação (A.8) e as definições (A.4) obtêm-se:

$$\alpha^1 = \gamma^0 \gamma^1 = \sigma^x, \quad \alpha^2 = \gamma^0 \gamma^2 = \sigma^y, \quad \beta \equiv \gamma^0 = \sigma^z \quad (\text{A.15})$$

Usando estas representações a Hamiltoniana de Dirac fica na forma:

$$H = c(\sigma^x p_x + \sigma^y p_y) + \sigma^z m c^2. \quad (\text{A.16})$$

sendo $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ o operador momento linear. Em forma matricial a Hamiltoniana acima fica ($\hbar = c = 1$):

$$H = \begin{pmatrix} m & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -m \end{pmatrix}. \quad (\text{A.17})$$

A corrente fermiônica em (2+1) dimensões é definida como em (3+1) [7]:

$$j^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \quad (\text{A.18})$$

sendo conservada, $\partial_\mu j^\mu = \partial_t j^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$. A densidade de probabilidade j^0 é dada por

$$j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \quad (\text{A.19})$$

e é positiva definida. Já a densidade de corrente \vec{j} pode ser escrita como:

$$\vec{j} = \bar{\psi}\vec{\gamma}\psi, \quad (\text{A.20})$$

que descreve o fluxo de probabilidade, sendo um vetor de duas componentes.

As simetrias discretas de Paridade \mathcal{P} e Reversão Temporal \mathcal{T} atuam de forma bem diferente que em (3+1) dimensões. Tais simetrias são essenciais para se entender a física dos isolantes topológicos e algumas de suas propriedades. Vamos discutir como estas simetrias atuam na equação de Dirac em (2+1) dimensões. A transformação de paridade é uma

reflexão das coordenadas espaciais $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, porém em (2+1) dimensões, caso atuasse desta forma esta transformação seria equivalente a uma rotação pois teria determinante +1 sendo uma transformação própria. A Paridade sendo uma transformação imprópria (discreta) deve possuir determinante -1 . Em (2+1) dimensões a transformação de Paridade consiste na reflexão de uma das coordenadas espaciais, qualquer uma delas e escolhemos como [127, 141]:

$$\mathcal{P} : (x, y) \rightarrow (x, -y). \quad (\text{A.21})$$

O espinor de Dirac $\psi(x)$ transforma-se sob paridade como:

$$\mathcal{P}\psi(x)\mathcal{P}^{-1} = \sigma^x\psi(t, x, -y) \quad (\text{A.22})$$

A Hamiltoniana de Dirac (A.16) transforma-se como:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}H(p_x, p_y, m)\mathcal{P}^{-1} &= \sigma^x H(p_x, -p_y, m)\sigma^x = p_x\sigma^x\sigma^x\sigma^x - p_y\sigma^x\sigma^y\sigma^x + m\sigma^x\sigma^z\sigma^x, \\ \mathcal{P}H(p_x, p_y, m)\mathcal{P}^{-1} &= p_x\sigma^x + p_y\sigma^y - m\sigma^z. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Observe que o termo de massa viola a simetria de paridade da teoria de Dirac em (2+1) dimensões. No caso da teoria com massa nula esta simetria é preservada.

Considere agora a simetria de Reversão Temporal. As coordenadas do espaço-tempo transformam-se como:

$$\mathcal{T} : (t, x, y) \rightarrow (-t, x, y), \quad (\text{A.24})$$

e o espinor de Dirac transforma-se:

$$\mathcal{T}\psi(x)\mathcal{T}^{-1} = \sigma^y\psi(-t, x, y). \quad (\text{A.25})$$

Como no caso da transformação de Paridade, o termo de massa $m\sigma^z$ na Hamiltoniana de Dirac quebra a simetria sob Reversão Temporal, sendo a teoria com massa nula invariante sob esta transformação.

O fato da Hamiltoniana de Dirac com massa violar a simetria de Paridade possui consequências físicas fundamentais para o estudo dos isolantes topológicos. Algumas destas consequências estão discutidas no Capítulo 2.

A.2 Soluções da equação de Dirac em 2+1 dimensões

Vamos apresentar algumas soluções da equação de Dirac em (2+1) dimensões que são úteis no corpo da tese. Considere primeiro uma partícula livre em repouso. Neste caso a equação de Dirac em forma Hamiltoniana (A.14) se torna:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \beta mc^2\psi = \sigma^z mc^2, \quad (\text{A.26})$$

que pode ser facilmente integrada levando a duas soluções independentes para o espinor:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2t/\hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{imc^2t/\hbar}. \quad (\text{A.27})$$

A interpretação destas soluções é que uma descreve uma partícula com energia $E = mc^2$ positiva e a outra descreve uma partícula com energia $E = -mc^2$ negativa, ou a antipartícula do elétron. Soluções de ondas planas da equação (A.14) podem ser expandidas na forma:

$$\psi(x) = u(p)e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}, \quad (\text{A.28})$$

com $E = \pm\sqrt{c^2(p_x^2 + p_y^2) + m^2c^4}$. A solução em termos de ondas planas para energia positiva fica:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{E + mc^2} \\ \sqrt{E - mc^2} e^{i\theta_0} \end{pmatrix} e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}, \quad (\text{A.29})$$

onde a condição de normalização escolhida é $\psi^\dagger\psi = 2E$, que permite tomar o limite de massa nula. É preciso tomar um pouco de cuidado ao se tomar o limite $m \rightarrow 0$, pois a interpretação da teoria sem massa é muito diferente da massiva [107]. Na solução (A.29) $p_x + ip_y = |\vec{p}|e^{i\theta_0} = \sqrt{E^2 - m^2c^4}e^{i\theta_0}$.

O espinor solução (A.29) é uma autofunção do momento linear e da energia. Outra forma de expressar a solução para a partícula livre é obter soluções que diagonalizam o operador momento angular:

$$\mathcal{J} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hbar}{2}\sigma^z. \quad (\text{A.30})$$

Soluções que diagonalizam este operador \mathcal{J} são ondas parciais que possuem mo-

mento angular total $j = (n + 1/2)\hbar$ dadas por (considerando apenas $E > 0$):

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{E + mc^2} J_n(pr) \\ i\sqrt{E - mc^2} J_{n+1}(pr) \end{pmatrix} e^{i(n+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sigma^z)\theta} e^{-iEt/\hbar}. \quad (\text{A.31})$$

$J_n(pr)$ é a função de Bessel de ordem n sendo n um inteiro positivo, podendo ser também 0. É importante enfatizar que as soluções com energia positiva da equação de Dirac em (2+1) dimensões com $m \neq 0$, são espinores que possuem apenas um grau de liberdade, cujo spin é $\frac{1}{2}\hbar$. Uma consequência disto, apresentada no Capítulo 3, é que na presença de interações apenas um único desvio de fase δ_n é encontrado, pois só existe um grau de liberdade para ser espalhado [127, 107].

Como um último exemplo de solução da equação de Dirac em (2+1) dimensões vamos discutir a solução na presença de um campo magnético externo uniforme, constante e perpendicular ao plano $x - y$. Considere $m = 0$, pois este caso é de interesse no estudo do grafeno e dos isolantes topológicos. A interação com um campo eletromagnético externo é obtida por meio do acoplamento mínimo [2, 32, 33] onde $\vec{P} \rightarrow \vec{P} + e\vec{A}$, sendo $\vec{A}(x)$ o potencial vetor que descreve o campo eletromagnético externo. O problema de auto-valor $H\psi = E\psi$ torna-se no espaço dos momentos:

$$c\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} + e\vec{A})\psi = E\psi. \quad (\text{A.32})$$

Considerando o chamado calibre de Landau onde $\vec{A} = B(-y, 0)$, têm-se duas equações acopladas, uma para cada componente do espinor:

$$c(p_x - eBy/c + ip_y)\psi_1 = E\psi_2 \quad (\text{A.33})$$

$$c(p_x - eBy/c - ip_y)\psi_2 = E\psi_1 \quad (\text{A.34})$$

e eliminando a componente ψ_1 do espinor esta equação fica na forma:

$$c^2(p^2 - 2eBy p_x - e^2 B^2 y^2 - \hbar e B)\psi_2 = E^2 \psi_2. \quad (\text{A.35})$$

Esta equação pode ser transformada por uma mudança de variáveis e escolhendo-se a dependência da função de onda em x como sendo uma onda plana na equação diferencial que descreve o oscilador harmônico simples. As autofunções e as auto-energias dos elétrons

com $E > 0$, podem ser obtidas mapeando-se este problema no OHS e as autoenergias são dadas por [142, 23]:

$$E_n = \sqrt{2e\hbar c^2 B n}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.36})$$

Para os elétrons descritos pela componente ψ_1 do espinor, isto é, aqueles com spin $+1/2$ as autoenergias são:

$$E_n = \sqrt{2e\hbar c^2 B(n+1)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.37})$$

As duas expressões anteriores podem ser escritas como:

$$E_n = \sqrt{2e\hbar c^2 B(n + 1/2 \pm 1/2)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (\text{A.38})$$

onde o sinal $+$ ($-$) está associado com o spin do elétron $1/2$ ($-1/2$). As autofunções podem ser obtidas em termos dos polinômios de Laguerre [23]. Note que sempre existe um modo com energia nula para $n = 0$ estando isso associado com o efeito Hall anômalo no grafeno como descrito no Capítulo 1.

Apêndice B

Isolantes Topológicos e Teoria de Campos Topológica

Estados topológicos da matéria como o Efeito Hall Quantizado (EHQ) e os Isolantes Topológicos (IT) podem ser descritos por meio de teorias de campo topológicas. Tais teorias são diferentes das teorias de campo que descrevem as interações fundamentais da natureza, como a de Maxwell que descreve o campo eletromagnético e a de Einstein que descreve campos gravitacionais. Estas teorias dependem da geometria do espaço onde os campos vivem. Ao contrário, em teorias de campo topológicas (TCT) os campos não dependem da geometria e sim da topologia do espaço onde vivem [5].

A primeira descrição de um estado topológico da matéria por meio de uma TCT foi feita por Zhang no caso do EHQ [79, 80]. Outros aspectos também foram investigados por Wen [81]. Tais teorias foram o ponto de partida para a construção de uma teoria de campos topológica para IT [16, 14, 143]. Neste apêndice faremos uma breve descrição dessa teoria, pois ela esclarece alguns aspectos dos IT e também na tentativa de deixar esta tese um pouco mais completa.

No Capítulo 2 discutimos a formulação dos IT em termos de uma teoria de bandas topológica. Tal teoria só é válida para sistemas não interagentes e sem desordem. Já uma formulação em termos de uma TCT em geral é válida para sistemas interagentes, incluindo desordem e ela identifica a resposta física associada com a ordem topológica [14, 16]. No

limite de um sistema não interagente, a teoria de campos topológica reduz-se a teoria de bandas topológica.

Em condutores usuais o campo elétrico \vec{E} e o campo magnético \vec{B} são quantidades bem-definidas e as equações de Maxwell permitem determinar tais campos em qualquer região do espaço-tempo, quando as fontes ρ e \vec{J} são especificadas. Na presença de meios materiais que podem polarizar e magnetizar, devido à presença de campos externos, as equações de Maxwell devem ser suplementadas pelas relações constitutivas, que relacionam a resposta do meio material quando campos externos são aplicados. Para meios materiais lineares tais relações são simples e dadas por [132]:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (\text{B.1})$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} + \vec{M}. \quad (\text{B.2})$$

A resposta de um condutor à aplicação de campos externos, como descrito acima, pode ser obtida da ação efetiva:

$$S_0 = \frac{1}{2} \int d^3x dt (\epsilon \vec{E}^2 - \frac{1}{\mu} \vec{B}^2) \quad (\text{B.3})$$

sendo ϵ e μ a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do meio, respectivamente. Essa ação depende da geometria do espaço-tempo onde se pretende estudar o comportamento dos campos e, para ver isso, considere-a escrita em termos do tensor campo eletromagnético, $F_{\mu\nu}$: $S_0 = -1/4 \int d^3x dt F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$. A soma sobre os índices repetidos μ e ν depende do tensor métrico do espaço-tempo, ou seja, da geometria, pois $F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = g_{\alpha\mu} g_{\beta\nu} F^{\alpha\beta} F^{\mu\nu}$, sendo $g_{\alpha\beta}$ a métrica do espaço-tempo. Por outro lado, uma TCT não depende da métrica do espaço-tempo, depende apenas da topologia dos campos que aparecem na ação.

Como um exemplo mais simples considere o EHQ. A TCT que descreve este sistema é dada por [79, 80]:

$$S[A] = \frac{C_1}{4\pi} \int d^2x \int dt A_\mu \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau, \quad (\text{B.4})$$

sendo $A_\mu(x)$ o potencial vetor que descreve o campo eletromagnético externo. O coeficiente C_1 no caso geral é dado por:

$$C_1 = \frac{\pi}{3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^2} \text{Tr}[\epsilon^{\mu\nu\rho} G \partial_\mu G^{-1} G \partial_\nu G^{-1} G \partial_\rho G^{-1}], \quad (\text{B.5})$$

$G(k) \equiv G(\vec{k}, \omega)$ é a função de Green para uma única partícula do sistema avaliada em tempo imaginário. No limite de um sistema sem interação a função de Green G deve ser trocada pela função de Green livre G_0 e integrando sobre a frequência a relação (B.5) reduz-se ao invariante TKNN, discutido no capítulo 2:

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \int dk_x \int dk_y \mathcal{F}(\vec{k}), \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{F} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}. \quad (\text{B.7})$$

$$\vec{\mathcal{A}} = \langle \psi_k | -i\vec{\nabla}_k | \psi_k \rangle. \quad (\text{B.8})$$

A quantidade C_1 é um inteiro. Todas as respostas do EHQ em baixas energias podem ser derivadas desta TCT, que descreve o sistema e é conhecida como teoria de Chern-Simons. Por exemplo, da ação efetiva (B.4) tomando-se a derivada funcional com relação ao campo A_μ obtêm-se a corrente:

$$j^\mu = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau. \quad (\text{B.9})$$

As componentes espaciais desta corrente são dadas por:

$$j^i = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{ij} E_j, \quad (\text{B.10})$$

enquanto a componente temporal é dada por:

$$j^0 = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{ij} \partial_i A_j = \frac{C_1}{2\pi} B. \quad (\text{B.11})$$

Isto é exatamente a resposta que o EHQ exhibe, com condutância Hall dada por $\sigma = C_1/2\pi$, indicando que um campo elétrico induz uma corrente elétrica transversa e um campo magnético induz um acúmulo de cargas no sistema. O termo cinético de Maxwell em (2+1) dimensões possui mais derivadas que o termo de Chern-Simons e portanto, em baixas energias (longos comprimentos de onda) não é tão relevante. Assim, todas as respostas topológicas do EHQ estão contidas na TCT (B.4).

Esta teoria de Chern-Simons pode ser generalizada para qualquer espaço-tempo com um número ímpar de dimensões e é o ponto de partida para se construir uma generalização

do EHQ em (4+1) dimensões que é invariante sob Reversão Temporal. Este estado é um isolante invariante sob \mathcal{T} , a partir do qual todos os casos em dimensões mais baixas podem ser obtidos por redução dimensional [16, 14]. Os detalhes deste procedimento podem ser obtidos nas referências [16, 14]. Vamos discutir o caso de mais interesse aqui, que são os IT tridimensionais.

A ação efetiva que descreve isolantes em (3+1) dimensões é dada por [16, 14]:

$$S_\theta = \frac{\theta\alpha}{4\pi^2} \int d^3x dt \vec{E} \cdot \vec{B}, \quad (\text{B.12})$$

onde $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ é a constante de estrutura fina e θ é um parâmetro de origem topológica, que distingue isolantes usuais (como o vácuo) para os quais $\theta = 0$, e isolantes topológicos, caracterizados por $\theta(\text{mod } 2\pi) = \pi$. O termo S_θ depende somente da topologia do espaço e não da sua geometria. Isso pode ser visto mais facilmente se reescrevermos a ação correspondente em termos de $F^{\mu\nu}$:

$$S_\theta = \frac{\theta\alpha}{32\pi^2} \int d^3x dt \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta} F^{\mu\nu} F^{\alpha\beta}, \quad (\text{B.13})$$

a qual não depende da métrica (geometria) do espaço-tempo, mas apenas da sua topologia (e da topologia do potencial $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$).

A teoria de campo topológica (TCT) descrita acima é válida para sistemas interagentes e descreve uma resposta magnetoelétrica quantizada chamada de efeito magnetoelétrico topológico e é idêntica a outra proposta por Wilczek para descrever o Axion [103], porém nesta θ é um campo dinâmico. O campo elétrico \vec{E} é invariante sob Reversão Temporal e o campo magnético \vec{B} muda de sinal sob tal operação; assim S_θ , quebra a simetria de Reversão Temporal comportando-se como um pseudoescalar. Contudo, para sistemas periódicos existem dois valores de θ , dados por $\theta = 0$ e $\theta = \pi$ que preservam a simetria de Reversão Temporal, já que para sistemas todas as quantidades físicas são invariantes por mudanças de θ por 2π . A quantização do parâmetro θ depende apenas da simetria \mathcal{T} e da topologia do *bulk* do material. Tal quantização é universal e independente dos detalhes do material. Como θ pode assumir apenas dois valores e ele pode ser naturalmente definido como um parâmetro de ordem topológica. Para sistemas interagentes θ é dado por [14]:

$$\theta = \frac{\pi^2}{3} \int_0^1 du \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \text{Tr} \epsilon^{\mu\nu\rho\tau} [G\partial_\mu G^{-1} G\partial_\nu G^{-1} G\partial_\rho G^{-1} G\partial_\tau G^{-1}], \quad (\text{B.14})$$

onde o momento $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ é integrado sobre a zona de Brillouin tridimensional e a frequência k_0 sobre todo o intervalo $(-\infty, \infty)$. G é a função de Gren para uma única partícula do sistema interagente e u é um parâmetro que suaviza essa função, quando é obtida por redução dimensional de 5 para 4 dimensões. Se a simetria de Reversão Temporal é violada o parâmetro θ pode variar continuamente e pode ser adiabaticamente mudado de π a 0. Isto é completamente diferente do que ocorre no EHQ onde o coeficiente C_1 é sempre um inteiro, independente de qualquer simetria do sistema. Quando esse é não interagente, a função de Green G deve ser trocada pela função de Green livre G_0 e neste caso a integral (B.14) pode ser avaliada analiticamente [16, 14].

Note que quando S_θ é escrita em termos do potencial vetor ela se anula, pois, $\vec{E} \cdot \vec{B}$ é uma derivada total de forma que um valor constante de θ não possui efeito algum em eletrodinâmica. Contudo em regiões onde θ sofrer variações, como na interface entre um isolante topológico, $\theta = \pi$ e o vácuo, $\theta = 0$, existe uma condutividade Hall associada com $\Delta\theta$ dada por $\sigma_{xy} = \Delta\theta e^2/2\pi h$. A quantidade θ/π é idêntica ao invariante ν_0 discutido anteriormente que caracteriza um isolante topológico.

Em (3+1) dimensões o termo topológico (B.15) possui o mesmo número de derivadas que o termo de Maxwell, assim em uma descrição efetiva em baixas energias os dois termos são importantes e a teoria topológica que descreve o sistema é dada por:

$$S = S_0 + S_\theta = \frac{1}{2} \int d^3x dt (\epsilon \vec{E}^2 - \frac{1}{\mu} \vec{B}^2) + \frac{\theta\alpha}{4\pi^2} \int d^3x dt \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (\text{B.15})$$

Esta ação descreve a resposta eletromagnética completa de um IT que leva a equações de Maxwell modificadas [103, 16, 14], porém, tal resposta pode ser descrita pelas equações de Maxwell convencionais suplementadas por relações constitutivas modificadas, dadas por:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} - 2\alpha P_3 \epsilon_0 c \vec{B}, \quad (\text{B.16})$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} + 2\alpha P_3 \epsilon_0 c \vec{E}, \quad (\text{B.17})$$

sendo $P_3 = \pm 1/2$, o quantum de condutância Hall na superfície do IT. Note que o efeito magnetoelétrico aparece nestas equações, pois existe uma contribuição topológica para \vec{D} devido a \vec{B} e uma para \vec{H} devido a \vec{E} .

Apesar do termo de Maxwell ser importante na descrição efetiva dos IT tridimensionais existem experimentos que podem extrair apenas a contribuição topológica da ação (B.15). A resposta topológica do IT tridimensional é dada pela derivada funcional da ação (B.15) com respeito ao campo A_μ :

$$j^\mu = \frac{1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\nu \theta \partial_\sigma A_\tau, \quad (\text{B.18})$$

que é a resposta topológica de um isolante em (3+1) dimensões. Essa resposta possui consequências físicas interessantes, algumas discutidas no Capítulo 2 e anteriormente neste apêndice. Dentre elas destacamos o efeito Hall na superfície de um IT onde θ varia e $\partial_\nu \theta \neq 0$. Outra é o efeito magnetoelétrico topológico. Um efeito interessante é o chamado efeito Witten que ocorre na presença de monopolos magnéticos. As componentes espaciais de (B.18) podem ser escritas na forma:

$$\vec{j} = -\frac{\partial_t \theta}{2\pi} \vec{B}, \quad (\text{B.19})$$

assumindo que θ é espacialmente uniforme e possui uma variação no tempo. Tomando a divergência de ambos lados desta equação têm-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = -\partial_t \rho_e = -\frac{\partial_t \theta}{2\pi} \vec{\nabla} \cdot \vec{B}, \quad (\text{B.20})$$

sendo ρ_e a densidade de carga elétrica. A divergência do campo magnético fornece a densidade de monopolos magnéticos ρ_m e a equação acima se integrada no espaço e no tempo fornece:

$$Q_e = \frac{\Theta}{2\pi} Q_m. \quad (\text{B.21})$$

Θ é a variação temporal de θ integrada no tempo e Q_m é a carga magnética. Esta relação foi derivada pela primeira vez em física de altas energias na Cromodinâmica e agora surge no contexto dos IT [14, 16]. Uma TCT pode ser obtida para se descrever IT bidimensionais, fazendo-se o procedimento de redução dimensional da teoria em (3+1) dimensões, os detalhes podem ser encontrados nas referências [16, 14].

Apêndice C

Gravitação em (2+1) Dimensões

Neste apêndice é apresentada uma breve revisão da teoria da gravitação de Einstein em espaço-tempo com (2+1) dimensões (2 dimensões espaciais e 1 temporal). São discutidos aqui alguns aspectos essenciais desta teoria que são utilizados nos capítulos 3 e 4. O objetivo deste apêndice é deixar esta tese mais didática, uma vez que o assunto abordado aqui não faz, na maioria das vezes, parte da formação de um físico da matéria condensada, dessa forma este apêndice, junto com os demais torna a leitura desta tese acessível a qualquer pessoa da área de matéria condensada, bem como outras áreas como física de partículas.

C.1 Equações de campo clássicas

A teoria clássica da Relatividade Geral (RG) em (2+1)D difere fundamentalmente da teoria em quatro dimensões e exibe algumas características não usuais que podem ser deduzidas das propriedades das equações de campo de Einstein e do tensor de curvatura de Riemann [119, 120, 144, 145, 146]. Em (2+1) dimensões as equações de campo de Einstein possuem a mesma forma que em (3+1) D [147, 148], a única diferença sendo no número de componentes do tensor métrico e do tensor de Riemann. As equações de campo são:

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \frac{8\pi G}{c^4}T_{\mu\nu}. \quad (\text{C.1})$$

Os índices μ e ν assumem os valores 0, 1 e 2. Do lado esquerdo das equações de campo (C.1) aparece a fonte de gravitação que é o tensor de energia-momento $T_{\mu\nu}$. G é a constante de Newton da gravitação em (2+1) dimensões e $R = R^\mu{}_\mu$ o escalar de curvatura. O tensor de Ricci $R_{\mu\nu} = R^\alpha{}_{\mu\nu\alpha}$ é obtido do tensor de Riemann $R^\mu{}_{\nu\alpha\beta}$ como em (3+1) dimensões. A diferença surge no número de componentes independentes que em (3+1) dimensões são vinte, enquanto em (2+1) dimensões são apenas seis. Já o tensor de Ricci possui o mesmo número de componentes independentes que o tensor de Riemann em (2+1) dimensões e os dois são completamente equivalentes sendo relacionados por meio do tensor de Einstein [120, 127]:

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu\alpha\beta} &= \epsilon_{\tau\mu\nu}\epsilon_{\rho\alpha\beta}G^{\tau\rho}, \\ G_{\mu\nu} &= R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R, \end{aligned} \tag{C.2}$$

onde $\epsilon_{\tau\mu\nu}$ é o tensor completamente antisimétrico nos três índices com $\epsilon_{012} = 1$.

O tensor métrico $g_{\mu\nu}(x)$ possui dez componentes em (3+1) dimensões e seis em (2+1) dimensões, porém em um espaço-tempo com d dimensões, as excitações de um campo descrito por um tensor simétrico como $g_{\mu\nu}(x)$ são descritas pela parte transversal com traço-nulo das componentes espaciais deste tensor sendo este número dado por $\frac{1}{2}d(d-3)$ [127], (número de componentes físicas independentes deste tensor). Assim em (3+1) dimensões $g_{\mu\nu}(x)$ possui duas componentes (ou dois graus de liberdade físicos) e em (2+1) dimensões este número é zero, ou seja, o campo gravitacional não possui dinâmica neste espaço-tempo, isto quer dizer que, não existem ondas gravitacionais (ou “grávitons”) no mesmo. De fato a força entre massas não é mediada por ondas gravitacionais classicamente e nem por “grávitons” quanticamente. Mas isto não quer dizer que não há interação. A interação entre fontes surge do fato que o espaço-tempo é localmente plano onde não há massas, mas possui em larga escala uma estrutura topológica não-trivial que determina trajetórias não triviais para as partículas [126].

Observe que em regiões onde $G_{\mu\nu} = 0$ a equação (C.2) implica que:

$$R_{\mu\nu\alpha\beta} = 0. \tag{C.3}$$

O que mostra que de fato não existe um campo de gravitação nesta teoria, sendo o espaço-

tempo plano, sem curvatura, onde não existe matéria nem energia, ou seja, onde o tensor de energia-momento $T_{\mu\nu}$ se anula. Curvatura só existe se o tensor de Ricci não é nulo, ou seja se existe a presença de matéria. Contudo, isto não significa que uma fonte massiva não tem efeitos gravitacionais: um feixe de luz passando por uma massa puntiforme será defletido [120, 121, 122, 123] e transporte paralelo em um circuito fechado em torno de uma massa puntiforme geralmente determina resultados não triviais [124, 125]. Já, enquanto a curvatura local se anula fora das fontes, há efeitos globais não triviais como veremos posteriormente.

Considere uma massa m localizada na origem do sistema de coordenadas em (2+1) dimensões. Qual a solução das equações de campo (C.1) na presença desta fonte? Este problema é o análogo da solução de Schwarzschild em (3+1) dimensões [147, 148], mas existem diferenças fundamentais entre as duas soluções. Para esta configuração de massa o tensor de energia-momento possui as componentes [120, 145]:

$$T^{00} = m\delta^2(\vec{r}), \quad T^{0i} = T^{ij} = 0, \quad i, j = 1, 2. \quad (\text{C.4})$$

Resolvendo-se as equações de campo (C.1), na presença desta fonte, leva ao seguinte tensor métrico, onde a parte espacial da métrica está escrita em coordenadas polares (r, θ) :

$$g_{\mu\nu}(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -r^{-8Gm} & 0 \\ 0 & 0 & -r^{-8Gm} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.5})$$

O elemento de linha deste espaço-tempo fica dado por, $dx^\mu = (dt, dr, r d\theta)$:

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^\mu dx^\nu = dt^2 - r^{-8Gm}(dr^2 + r^2 d\theta^2). \quad (\text{C.6})$$

Como a curvatura deste espaço se anula em todos os pontos, exceto na origem onde a massa se encontra, pode-se fazer uma transformação de coordenadas para coordenadas planas (ρ, ϕ) :

$$\rho = \frac{r^{1-4Gm}}{1-4Gm}, \quad (\text{C.7})$$

$$\phi = \theta(1-4Gm) = \theta\eta, \quad (\text{C.8})$$

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \rho^2 d\phi^2. \quad (\text{C.9})$$

Embora neste sistema de coordenadas a situação pareça trivial é preciso ter cuidado, pois a coordenada ϕ varia desde 0 até $2\pi(1 - 4Gm)$. Existe um déficit de ângulo no espaço como mostrado na figura C.1. É sempre possível transformar a métrica $g_{\mu\nu}(x)$ para coordenadas planas onde $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu}$, porém o preço a ser pago para isso são as condições de contorno não triviais sobre a coordenada angular onde, os pontos $\phi = 0$ e $\phi = 2\pi(1 - 4Gm)$ devem ser identificados como sendo o mesmo ponto [119, 120, 144, 145, 146]. Resumindo, uma massa puntiforme m na origem cria um espaço-tempo localmente plano, mas com uma identificação global de coordenadas não-trivial que revela a presença de uma partícula puntiforme massiva [126]. A identificação é:

$$(t, r, \phi) \rightarrow (t, r, \phi + 2\pi(1 - 4Gm)). \quad (\text{C.10})$$

A parte espacial da métrica é aquela de um cone cujo ângulo de abertura (ângulo que a superfície faz com seu eixo de simetria) depende do valor da massa m sendo dado por:

$$\sin \alpha = 1 - 4Gm. \quad (\text{C.11})$$

Quanto maior a massa m mais pontiagudo é o cone. Outra forma de escrever esta métrica que será útil é a seguinte:

$$ds^2 = dt^2 - dr^2 - r^2\eta^2 d\theta^2, \quad (\text{C.12})$$

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad \eta = 1 - 4Gm. \quad (\text{C.13})$$

Alternativamente, pode-se usar coordenadas embebidas no espaço Euclidiano tridimensional r e θ que estendem sobre todo o alcance $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e descrevem um cone com a restrição $z = \sqrt{(\eta^{-2} - 1)(x^2 + y^2)}$, sendo o elemento de linha dado por [107]:

$$ds^2 = dt^2 - \eta^{-2}dr^2 - r^2d\theta^2. \quad (\text{C.14})$$

Embora em gravitação planar a situação pareça trivial como discutido anteriormente, os atributos da fonte de gravitação (massa, spin se for o caso) são contidos nas propriedades globais das coordenadas planas. Todas as informações residem em condições de contorno não triviais que são cruciais no estudo do movimento de partículas puntiformes neste espaço-tempo, tanto classicamente, como do ponto de vista quântico [107, 127]. Em

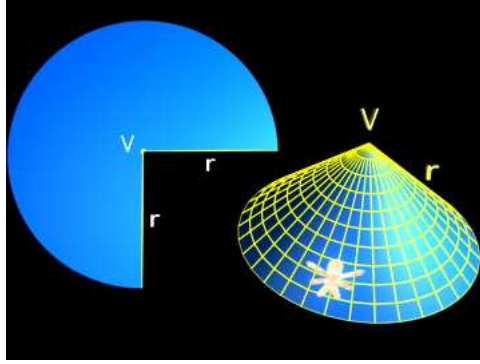


Figura C.1: Representação geométrica da parte espacial da métrica criada por uma massa puntiforme localizada em V . O espaço é plano com um déficit de ângulo e as bordas r identificadas, o que gera um cone.

todo este apêndice estamos considerando que $4Gm \leq 1$. Para $4Gm > 1$ o espaço muda completamente suas características, tornando sua descrição complexa e para $4Gm = 1$ o espaço torna-se um cilindro [126].

Há outras soluções apresentadas na literatura para as equações de campo (C.1) que podem ser encontradas, por exemplo nas referências [120, 144, 145, 146]. Não será discutida nenhuma outra solução aqui, pois esta apresentada acima é a única de interesse para compreender as discussões feitas nos capítulos 3 e 4. Considere agora alguns efeitos que uma massa puntiforme estática pode produzir no movimento de partículas em um espaço-tempo com métrica (C.9).

Considere uma partícula clássica se movendo no espaço criado por uma massa puntiforme m estática, cuja métrica é dada por (C.6). Para estudar a interação entre estas duas partículas é possível utilizar um sistema de coordenadas do centro de massa e as partículas se movem em torno do centro de massa em um potencial efetivo que descreve a interação. O mesmo problema surge sem a redução para o centro de massa, no limite em que a massa de uma das partículas é muito maior que a outra. Dessa forma é suficiente considerar o problema de uma partícula teste com uma determinada massa movendo-se no campo produzido por uma partícula estática na origem [126].

As equações clássicas de movimento são determinadas pela equação da geodésica

[147, 148]:

$$\ddot{x}^\mu + \Gamma_{\alpha\beta}^\mu \dot{x}^\alpha \dot{x}^\beta = 0 \quad (\text{C.15})$$

onde o ponto significa diferenciação com respeito a qualquer coordenada afim τ que parametriza o caminho $x^\mu(\tau)$ [107]. $\Gamma_{\alpha\beta}^\mu$ é o chamado símbolo (ou conexão) de Christoffel que é obtido da métrica do espaço-tempo $g_{\mu\nu}(x)$ [147, 148]:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} (\partial_\beta g_{\nu\alpha} + \partial_\alpha g_{\beta\nu} - \partial_\nu g_{\alpha\beta}) \quad (\text{C.16})$$

Utilizando as coordenadas embebidas (C.14) as únicas componentes não nulas da conexão são:

$$\Gamma_{22}^1 = -\eta^2 r, \quad \Gamma_{12}^2 = \frac{1}{r}. \quad (\text{C.17})$$

As equações clássicas de movimento (C.15) podem ser integradas para determinar a posição da partícula em função do tempo [107]. A partir destas equações pode se obter o ângulo de espalhamento da partícula teste [107, 126]:

$$\pm \omega = \pm \pi \frac{1 - \eta}{\eta}. \quad (\text{C.18})$$

O sinal \pm se refere ao lado em que a partícula teste passa pela fonte, direito + ou esquerdo $-$. É fácil entender este resultado, pois em coordenadas planas não existe espalhamento, as trajetórias são linhas retas, porém, quando a identificação (C.10) é feita as trajetórias devem se curvar determinando o ângulo de espalhamento acima. Note que o ângulo de espalhamento não depende da energia nem do parâmetro de impacto das partículas, uma vez que o que determina este é a identificação (C.10) [107, 126].

C.2 Efeito Aharonov-Bohm gravitacional

A teoria da gravitação em (2+1) dimensões, embora pareça uma teoria trivial, pois o espaço-tempo é plano onde $T^{\mu\nu}$ anula-se possui efeitos não triviais interessantes. Um destes surge quando se considera o transporte paralelo de um espinor ou de um vetor em um circuito fechado em torno de uma fonte estática. Este efeito é chamado de efeito Aharonov-Bohm gravitacional [124, 125, 149], pois como no caso eletromagnético a partícula sente os efeitos da presença da fonte (uma massa em gravitação ou um fluxo de \vec{B} no caso

eletromagnético) sem se mover na presença dos campos de forças criados por elas. Vamos analisar este efeito no caso gravitacional.

Considere um espinor $\psi(x)$ que vive no espaço-tempo gerado por uma massa puntiforme estática em (2+1) dimensões. Considere um caminho x^μ parametrizado por τ , $x^\mu = x^\mu(\tau)$. O transporte paralelo do espinor em τ é dado em termos do espinor em $\tau = 0$ por:

$$\frac{D\psi}{D\tau} = 0 = \frac{dx^\mu}{d\tau} \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \omega_\mu \right] \psi = \left[\frac{d}{d\tau} - \frac{dU}{d\tau} U^{-1} \right] \psi. \quad (\text{C.19})$$

Sendo ω_μ a conexão de spin que é uma matriz 2×2 e U é um elemento de $SO(1,1)$ que transforma a conexão de spin de um sistema de coordenadas para outro [124]. A equação (C.19) pode ser integrada fornecendo:

$$\psi_a(\tau) = U_a{}^b \psi_b(0). \quad (\text{C.20})$$

Utilizando-se a métrica (C.12) pode-se calcular a conexão de spin e a matriz U que fornece o resultado [124]:

$$\omega = -\frac{1}{2}(\eta - 1)\sigma^z d\theta, \quad U = e^{\frac{i}{2}(\eta-1)\sigma^z \theta}. \quad (\text{C.21})$$

Note que a conexão tem a propriedade de se anular quando o espaço é plano $\eta = 1$. Considerando um circuito fechado em torno da origem onde a massa m se encontra obtêm-se para o transporte paralelo do espinor ψ [124, 125]:

$$\psi(2\pi) = e^{i(\eta-1)\sigma^z \pi} \psi(0), \quad (\text{C.22})$$

$$\psi(2\pi) = [\cos(\eta - 1)\pi + i\sigma^z \sin(\eta - 1)\pi] \psi(0). \quad (\text{C.23})$$

Esta última equação pode também ser escrita na forma:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(2\pi) \\ \psi_2(2\pi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(i(\eta - 1)\pi) & 0 \\ 0 & \exp(-i(\eta - 1)\pi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.24})$$

note que existe uma diferença de fase (efeito Aharonov-Bohm gravitacional) entre as duas componentes do espinor após o transporte paralelo em torno da massa. Se η for um inteiro ímpar este efeito se anula

Similarmente as componentes espaciais de um vetor também sentem os efeitos deste transporte paralelo em torno da massa. As equações de transporte paralelo para um vetor [147, 148] podem ser integradas determinando [124, 125]:

$$\begin{pmatrix} V_r(2\pi) \\ V_\theta(2\pi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2\pi\eta & \frac{1}{r_0\eta} \sin 2\pi\eta \\ -r\eta \sin 2\pi\eta & \frac{r}{r_0} \cos 2\pi\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_r(0) \\ V_\theta(0) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.25})$$

com as condições iniciais de que quando $\theta = 0$ têm-se $r = r_0$. A componente temporal do vetor V_t não muda por isso ela foi omitida. Note que no caso de vetores somente se $\eta = 1$ não haverá efeito Aharonov-Bohm gravitacional. Espinores são mais sensíveis que vetores para detectar tais efeitos em gravitação planar. Outra forma de se obter estes resultados que não necessita da integração das equações de transporte paralelo é por meio de produtos de caminhos ordenados da conexão, que definem uma matriz de holonomia que fornece as transformações de espinores e vetores acima [125].

C.3 Equação de Dirac em um cone

Considere a equação de Dirac em (2+1) dimensões descrevendo um elétron que se move em um espaço cônico. As autofunções e auto-energias desta partícula são obtidas da solução da equação de Dirac no cone. Em coordenadas curvas a equação de Dirac torna-se:

$$(i\hbar\gamma^a E_a{}^\mu D_\mu - mc^2)\psi(x) = 0, \quad (\text{C.26})$$

onde $E_a{}^\mu$ é o dreibein que faz a conexão entre as coordenadas planas e curvas e D_μ é a derivada covariante que pode ser escrita na forma [107]:

$$D_\mu = \partial_\mu - \frac{1}{2}\omega_\mu{}^a\gamma_a \quad (\text{C.27})$$

A conexão de spin é obtida do dreibein $E_a{}^\mu$ e da sua inversa $e_\nu{}^b$. No sistema de coordenadas embebidas (t, r, θ) cuja métrica é dada por (C.14), o dreibein e sua inversa são dados por:

$$E_a{}^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta \cos \theta & -\frac{1}{r} \sin \theta \\ 0 & \eta \sin \theta & \frac{1}{r} \cos \theta \end{pmatrix}, \quad e_\nu{}^b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\eta} \cos \theta & \frac{1}{\alpha} \sin \theta \\ 0 & -r \sin \theta & r \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{C.28})$$

A conexão de spin é determinada pela relação $\epsilon^{\lambda\mu\nu}\partial_\mu e_\nu^a = \epsilon^{\lambda\mu\nu}\epsilon^a{}_{bc}\omega_\mu{}^b e_\nu{}^c$. A única componente diferente de zero da conexão de spin é:

$$\omega_\theta{}^0 = \eta - 1. \quad (\text{C.29})$$

Com todas as definições acima a equação de Dirac (C.27) torna-se:

$$\left(i \left[\gamma^0 \partial_t + \gamma^r \left(\eta \partial_r - \frac{1-\eta}{2r} \right) + \gamma^\theta \frac{1}{r} \partial_\theta \right] - m \right) \psi \quad (\text{C.30})$$

onde $\gamma^r = \cos \theta \gamma^1 + \sin \theta \gamma^2$, $\gamma^\theta = -\sin \theta \gamma^1 + \cos \theta \gamma^2$. Todas as escolhas e convenções feitas aqui são tais que, sempre permitem tomar o limite $m \rightarrow 0$, obtendo a solução para férmions sem massa.

A invariância rotacional da equação de Dirac no cone (C.30) possibilita escolher soluções com energia positiva que são autofunções do momento angular com autovalor $(n + 1/2)\hbar$:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{E + mc^2} u_n^{(1)}(r) \\ i\sqrt{E - mc^2} u_n^{(2)}(r) \end{pmatrix} e^{i(n+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sigma^z)\theta} e^{-iEt/\hbar}. \quad (\text{C.31})$$

Assim a equação (C.30) se reduz a um sistema de duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acopladas, que podem ser resolvidas por meio das funções de Bessel [106].

As soluções para $E > mc^2$ (ou $E > 0$ no caso de massa nula) são:

$$\begin{aligned} u_n^{(1)}(r) &= (\epsilon_n)^n J_{\xi^+}(\kappa r), \\ u_n^{(2)}(r) &= (\epsilon_n)^{n+1} J_{\xi^-}(\kappa r). \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

Aqui, $\xi^\pm = \frac{\epsilon_n}{\eta}(n + (1 \mp \eta)/2)$ é a ordem das funções de Bessel, $\kappa = \sqrt{E^2 c^2 - m^2 c^4}/\eta$ e $\epsilon_n = \pm 1$ sendo que o mesmo sinal tem que ser escolhido para as duas componentes do espinor. Quando $0 < \eta \neq 1$, para se ter as duas componentes regulares na origem deve-se escolher $\epsilon_n = \text{sign}(n + (1 - \eta)/2) = \text{sign } n$, ($\text{sign } 0 \equiv 1$). Observe que as funções de Bessel são de ordem fracional, sendo justamente nesse ponto e em κ que entra a informação sobre a massa que gera o cone. No caso de $\eta = 1$ esta solução recobre a apresentada no Apêndice A para o espaço plano.

Referências Bibliográficas

- [1] X.G. Wen, “*Quantum Field Theory of Many-Body Systems - From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons*”, Oxford University Press, (2004).
- [2] S. Weinberg, “*The Quantum Theory of Fields*”, Cambridge University Press, (1995).
- [3] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky, “*Principles of condensed matter physics*”, Cambridge University Press, (1995).
- [4] D.J. Thoules, “*Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*”, World Scientific (1998).
- [5] S.C. Zhang, “*Topological states of quantum matter*”, Physics **1**, 6 (2008).
- [6] M. Nakahara, “*Geometry, topology and physics*”, A. Hilger (1990).
- [7] J.J. Sakurai, “*Modern Quantum Mechanics*”, Addison-Wesley Publishing Company Inc. (1994).
- [8] L. Balentine, “*Quantum Mechanics: a Modern Development*”, World scientific Publishing (1998).
- [9] X.L. Qi and S.C. Zhang, “*The quantum spin Hall effect and topological insulators*”, Phys. Today, **63**, 33 (2010).
- [10] C. Kane and J. Moore, “*Topological insulators*”, Physics World, february, 32 (2011).
- [11] J.E. Moore, “*The birth of topological insulators*”, Nature, **464**, 194 (2010).

- [12] M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T.L. Hughes, C.X. Liu, X.L. Qi and S.C. Zhang, “*The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment*”, cond-mat.mes-hall, arXiv:0801.0901v1 (2008).
- [13] M.Z. Hasan and C.L. Kane, “*Colloquium: Topological insulators*”, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [14] X.L. Qi and S.C. Zhang, Rev. Mod. Phys., “*Topological insulators and superconductors*”, **83**, 1057 (2011).
- [15] M.Z. Hasan and J. E. Moore, “*Three-Dimensional Topological Insulators*”, Annu. Rev. Cond. Matt. Phys. **2**, 55 (2011).
- [16] X.L. Qi, T.L. Hughes and S.C. Zhang, “*Topological field theory of time-reversal invariant insulators*”, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
- [17] X.L. Qi, R. Li, J. Zang and S.C. Zhang, “*Inducing a Magnetic Monopole with Topological Surface States*”, Science **323**, 1184 (2009).
- [18] L. Fu and C.L. Kane, “*Superconducting Proximity Effect and Majorana Fermions at the Surface of a Topological Insulator*”, Phys. Rev. Lett. **100**, 096407 (2008).
- [19] F. Wilczek, “*Majorana returns*”, Nature Phys. **5**, 614 (2009).
- [20] J.C.Y. Teo and C.L. Kane, “*Majorana Fermions and Non-Abelian Statistics in Three Dimensions*”, Phys. Rev. Lett. **104**, 046401 (2010).
- [21] A.K. Geim and K.S. Novoselov, “*The rise of graphene*”, Nature Mat.**6**, 183 (2007).
- [22] A. Geim and A.L. MacDonald, “*Graphene: Exploring carbon flatland*”, Phys. Today, **60**, 35 (2007).
- [23] A.H. Castro-Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov and A.K. Geim, “*The electronic properties of graphene*”, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [24] P.R. Wallace, “*The band theory of graphite*”, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).

- [25] J.W. McClure, “*Band Structure of Graphite and de Haas-van Alphen Effect*”, Phys. Rev. **108**, 612 (1957).
- [26] J.C. Slonczewski and P.R. weiss, “*Band Structure of Graphite*”, Phys. Rev. **109**, 272 (1958).
- [27] J.M. Fonseca, W.A. Moura-Melo and A.R. Pereira, “*Scattering of charge carriers in graphene induced by topological defects*”, Phys. Lett. A **374**, 4359 (2010).
- [28] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, “*Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*”, Science **306**, 666 (2004).
- [29] K.S. Novoselov, et. al., “*Two-dimensional atomic crystals*”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **102**, 10451 (2005).
- [30] N. D. Mermin and H. Wagner, “*Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*”, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966); errata: Phys. Rev. Lett. **17** 1307 (1966).
- [31] Q. Tannock, “*Exploiting carbon flatland*”, Nature Materials, **11**, 2 (2011).
- [32] J.J. Sakurai, “*Advanced Quantum Mechanics*”, Addison-Wesley Publishing Company Inc. (1967).
- [33] C. Itzykson and J.B. Zuber, “*Quantum Field Theory*”, Dover, New york, (2005).
- [34] M.I. Katsnelson and K.S. Novoselov, “*Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics*”, Sol. Stat. Comm. **143**, 3 (2007).
- [35] A. Calogeracos, “*Relativistic quantum mechanics: Paradox in a pencil*”, Nature Physics **2**, 579 (2006).
- [36] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov and A.K. Geim, “*Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*”, Nature Physics **2**, 620 (2006).

- [37] A. V. Shytov, M.I. Katsnelson, and L.S. Levitov, “*Vacuum Polarization and Screening of Supercritical Impurities in Graphene*”, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801 (2007).
- [38] A. V. Shytov, M.I. Katsnelson, and L.S. Levitov, “*Atomic Collapse and QuasiRydberg States in Graphene*”, Phys. Rev. Lett. **99**, 246802 (2007).
- [39] Yu-Ming Lin, et al, “*Wafer-Scale Graphene Integrated Circuit*”, Science **332**, 1294 (2011).
- [40] H. Bayley, “*Holes with an edge*”, Nature **467**, 190 (2010).
- [41] <http://www.eetimes.com/electronics-news/4204935/Researchers-say-carbon-based-platform-beats-silicon-for-detection>
- [42] J.M. Fonseca, W.A. Moura-Melo and A.R. Pereira, “*Effects of lattice defects in graphene on the scattering of Charge Carriers*”, Proceedings of Science, **ICFI**, 015-1 (2010).
- [43] J.M. Fonseca, W.A. Moura-Melo and A.R. Pereira, trabalho em progresso.
- [44] Q. Liu, C.X. Liu, C. Xu, X.L. Qi and S.C. Zhang, “*Magnetic Impurities on the Surface of a Topological Insulator*”, Phys. Rev. Lett. **102**, 156603 (2009).
- [45] K. Nomura and N. Nagaosa, “*Electric charging of magnetic textures on the surface of a topological insulator*”, Phys. Rev. B **82**, 161401 (2010).
- [46] I. Garate and M. Franz, “*Inverse Spin-Galvanic Effect in the Interface between a Topological Insulator and a Ferromagnet*”, Phys. Rev. Lett. **104**, 146802 (2010).
- [47] Y.L. Chen, et. al., “*Massive Dirac Fermion on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator*”, Science **329**, 659 (2010).
- [48] D. A. Abanin and D. A. Pesin, “*Ordering of magnetic impurities and tunable electronic properties of topological insulators*”, Phys. Rev. Lett. **106**, 136802 (2011).

- [49] J.M. Fonseca, W.A. Moura-Melo and A.R. Pereira, “*Geometrically induced electric polarization in conical topological insulators*”, cond-mat.str-el, arXiv:1111.6893v1 (2011).
- [50] C. Furtado, F. Moraes and A.M. de M. Carvalho, “*Geometric phases in graphitic cones*”, Phys. Lett. A **372**, 5368 (2008).
- [51] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, “*Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*”, Nature **438**, 197 (2005).
- [52] M. Wilson, “*Electrons in Atomically Thin Carbon Sheets Behave Like Massless Particles*”, Phys. Today 21 (2006).
- [53] N.W. Ashcroft and N. D. Mermin, “*Solid State Physics*”, Brooks Cole, (1976).
- [54] G.W. Semenoff, “*Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*”, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).
- [55] Riazuddin, “*Dirac equation in (1+2) dimensions for quasi-particles in graphene and quantum field theory of their Coulomb interaction*”, arXiv:/cond-mat/0807.4804v1 (2008).
- [56] M.O. Goerbig, “*Electronics properties of graphene in a strong magnetic field*”, Rev. Mod. Phys. **83**, 1193 (2011).
- [57] N.M.R. Peres, “*The transport properties of graphene: An introduction*”, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673 (2010).
- [58] S.D. Sarma, “*Electronic transport in two-dimensional graphene*”, Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011).
- [59] D.S.L. Abergela, V. Apalkovb, J. Berashevicha, K. Zieglerc and T. Chakrabortya, “*Properties of graphene: a theoretical perspective*”, Advances in Physics **59**, 261 (2010).

- [60] M.A.H. Vozmediano, M.I. Katsnelson and F. Guinea, “*Gauge fields in graphene*”, Phys. Rep. **496**, 109 (2010).
- [61] K.S. Novoselov, et. al., “*Room-temperature quantum Hall effect in Graphene*” Science **315**, 1379 (2007).
- [62] Y. Zhang, Y.W. Tan, H.L. Stormer and Philip Kim, “*Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene*”, Nature, **438**, 201 (2005).
- [63] M.I. Katsnelson, “*Graphene: carbon in two dimensions*”, Materials Today, **10**, 20 (2007).
- [64] J.K. Pachos and M. Stone, “*An Index Theorem for Graphene*”, arXiv:/cond-mat/0607394v4 (2007).
- [65] F. Guinea, B. Horovitz and P.L. Doussal, “*Gauge fields, ripples and wrinkles in graphene layers*” Sol. Stat. Comm. **149**, 1140 (2009).
- [66] C.L. Kane and E.J. Mele, “*Quantum Spin Hall Effect in Graphene*”, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [67] X.F. Wang and T. Chakraborty, “*Collective excitations of Dirac electrons in a graphene layer with spin-orbit interactions*”, Phys. Rev. B **75**, 033408 (2007).
- [68] F.D.M. Haldane, “*Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the Parity Anomaly*”, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [69] A. Yacoby, “*Tri and Tri again*”, Nature Phys. **7**, 925 (2011).
- [70] B.A. Bernevig, T. L. Hughes and S. C. Zhang, “*Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*”, Science, **314**, 1757 (2006).
- [71] C.H. Kane and E. Mele, “*A New Spin on the Insulating State*”, Science **314**, 1692 (2006).

- [72] B.A. Bernevig and S.C. Zhang, “*Quantum Spin Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).
- [73] K.V. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, “*New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance*”, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [74] D.J. Thoules, M. Kohmoto, P. Nightingale and M. den Nijs, “*Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential*”, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [75] M. Kohmoto, “*Topological invariant and the quantization of the Hall conductance*”, Ann. Phys. **160**, 343 (1985).
- [76] M.V. Berry, “*Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes*”, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984).
- [77] H. Aoki, “*Quantised Hall effect*”, Rep. Prog. Phys. **50**, 655 (1987).
- [78] H.L. Stormer and D.C. Tsui, “*The Quantized Hall Effect*”, Science **220**, 1241 (1983).
- [79] S.C. Zhang, T.H. Hansson and S. Kivelson, “*Effective-Field-theory Model for the fractional Quantum Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. **62**, 82 (1989).
- [80] S.C. Zhang, “*The Chern-Simons-Landau-Ginzburg Theory of the Fractional Quantum Hall Effect*”, Int. J. Mod. Phys. B, **6**, 25 (1992).
- [81] X.G. Wen, “*Topological Orders and Edge Excitations in FQH States*”, Adv. Phys. **44**, 405 (1995).
- [82] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. Molenkamp, X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “*Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*”, Science, **318**, 766 (2007).
- [83] J.E. Moore and L. Balents, “*Topological invariants of time-reversal-invariant band structure*”, Phys. Rev. B **75**, 121306 (2007).

- [84] C.L. Kane and E.J. Mele, “*Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
- [85] R. Roy, “*Z₂ classification of quantum spin Hall systems: An approach using time-reversal invariance*”, Phys. Rev. B **79**, 195321 (2009).
- [86] Z. Wang, X. L. Qi and S. C. Zhang, “*Equivalent topological invariants of topological insulators*”, New J. Phys. **12**, 065007 (2010).
- [87] C. Wu, B.A. Bernevig and S.C. Zhang, “*Helical Liquid and the Edge of Quantum Spin Hall Systems*”, Phys. Rev. Lett. **96**, 106401 (2006).
- [88] S. Murakami, “*Quantum Spin Hall Effect and Enhanced Magnetic Response by Spin-Orbit Coupling*” Phys. Rev. Lett. **97**, 236805 (2006).
- [89] C.X. Liu, X.L. Qi, H.J. Zhang, X. Dai, Z. Fang and Shou-Cheng Zhang, “*Model Hamiltonian for topological insulators*”, Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
- [90] L. Fu, C.L. Kane and E.J. Mele, “*Topological Insulators in Three Dimensions*” Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
- [91] L. Fu and C.L. Kane, “*Topological insulators with inversion symmetry*”, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
- [92] D. Hsieh, et. al., “*A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase*”, Nature, **452**, 970 (2008).
- [93] D. Hsieh, “*The experiemntal discovery of topological insulators*”, VDM Publishing House ltda (2009).
- [94] H. Zhang, C.X. Liu, X.L. Qi, X. Dai, Z. Fang and S.C. Zhang, “*Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ e Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface*”, Nat. Phys., **5**, 438 (2009).
- [95] J. Moore, “*Topological insulators: The next generation*”, Nat. Phys. **5**, 378 (2009).

- [96] R. Roy, “*Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions*”, Phys. Rev. B **79**, 195322 (2009).
- [97] C.L. Kane, “*An insulator with a twist*”, Nature Phys. **4**, 348 (2008).
- [98] A.M. Essin, J.E. Moore and D. Vanderbilt, “*Magnetoelectric Polarizability and Axion Electrodynamics in Crystalline Insulators*”, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).
- [99] T.L. Hughes, “*Time Reversal Invariant Topological Insulators*”, disponível em: <http://boulder.research.yale.edu/Boulder-2010/Lectures/Students>.
- [100] R. Jackiw, “*Fractional charge and zero modes for planar systems in a magnetic field*” Phys. Rev. D **29**, 2375 (1984).
- [101] M. Franz, “*In Praise of Exact Quantization*”, Science **329**, 639 (2010).
- [102] Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, M. Hashimoto, T. Sasagawa, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, “*Massive Dirac Fermion on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator*”, Science **329**, 659 (2010).
- [103] F. Wilczek, “*Two applications of axion electrodynamics*”, Phys. Rev. Lett. **58**, 1799 (1987).
- [104] A. Karch, “*Electric-Magnetic Duality and Topological Insulators*”, Phys. Rev. Lett., **103**, 171601 (2009).
- [105] M.I. Katsnelson and A.K. Geim, “*Electron scattering on microscopic corrugations in graphene*”, Phil. Trans. R. Soc. A **366**, 195 (2008).
- [106] P.M. Morse and H. Feshbach, “*Methods of Theoretical Physics*”, McGraw-Hill New York (1953).
- [107] P. de S. Gerbert and R. Jackiw, “*Classical and Quantum Scattering on a Spinning cone*” Commun. Math. Phys. **124**, 229 (1989).

- [108] M.I. Katsnelson, “*Scattering of charge carriers by point defects in bilayer graphene*”, Phys. Rev. B **76**, 073411 (2007).
- [109] M. Auslender and M. I. Katsnelson, “*Generalized kinetic equations for charge carriers in graphene*”, Phys. Rev. B **76**, 235425 (2007).
- [110] G.M. Rutter, J.N. Crain, N.P. Guisinger, T. Li, P.N. First and J.A. Stroscio, “*Scattering and Interference in Epitaxial Graphene*”, Science **313**, 219 (2007).
- [111] M.I. Katsnelson F. Guinea and A.K. Geim, “*Scattering of electrons in graphene by clusters of impurities*”, Phys. Rev. B **79**, 195426 (2009).
- [112] S. Garaj, W. Hubbard, A. Reina, J. Kong, D. Branton and J. A. Golovchenko, “*Graphene as a subnanometre trans-electrode membrane*”, Nature, **467**, 190 (2010).
- [113] A. Cortijo and M. A.H. Vozmediano, “*Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene*”, Nucl. Phys. B **763**, 293 (2007).
- [114] Yu.A. Sitenko and M. N.D. Vlasii, “*Electronic properties of graphene with a topological defect*”, Nucl. Phys. B **787**, 241 (2007).
- [115] A. Krishnan, E. Dujardin, M.M.J. Treacy, J. Hugdahl, S. Lynum, and T.W. Ebbesen, Nature **388**, 451 (1997).
- [116] M. Ge and K. Sattler, “*Observation of Fullerene Cones*”, Chem. Phys. Lett. **220**, 192 (1994).
- [117] A. Hashimoto, K. Suenaga, A. Gloter, K. Urita and S. Iijima, “*Direct evidence for atomic defects in graphene layer*”, Nature **430**, 870 (2004).
- [118] G.E. Volovik, “*The Universe in a Helium Droplet*”, Clarendon Press, Oxford (2003).
- [119] J.D. Brown, “*Lower Dimensional Gravity*”, World Scientific, New Jersey (1988).
- [120] A. Staruszkiewicz, “*Gravitation Theory in Three-Dimensional Space*” Acta. Phys. Polon. **24**, 734 (1963).

- [121] S. Deser, R. Jackiw, and G. 't Hooft, “*Three-dimensional Einstein gravity: Dynamics of flat space*”, Ann. Phys. (N.Y.) **152**, 220 (1984).
- [122] S. Giddings, J. Abbott, and K. Kuchar, “*Einstein’s theory in a three-dimensional space-time*”, Gen. Relativ. Gravit. **16**, 751 (1984).
- [123] A. Vilenkin, “*Gravitational field of vacuum domain walls and strings*” Phys. Rev. D **23**, 852 (1981).
- [124] C.J.C. Burges, “*Gravitational Aharonov-Bohm effect in three dimensions*”, Phys. Rev. D **32**, 504 (1984).
- [125] V.B. Bezerra, “*Gravitational analogue of the Aharonov-Bohm effect in four and three dimensions*”, Phys. Rev. D **35**, 2031 (1987).
- [126] R. Jackiw, “*Topics in Planar Physics*”
- [127] S. Deser, R. Jackiw and S. Templeton, “*Topologically Massive Gauge Theories*”, Ann. of Phys. **281**, 409 (2000).
- [128] V.A. Osipov and E.A. Kochetov, “*Dirac fermions on graphite cones*”, JETP Lett. **73**, 631 (2001).
- [129] A. Cortijo and M.A.H. Vozmediano, “*Electronic properties of curved graphene sheets*”, arXiv:cond-mat/0603717v3 (2007).
- [130] D.H. Lee, “*Surface States of Topological Insulators: The Dirac Fermion in Curved Two-Dimensional Spaces*”, Phys. Rev. Lett. **103**, 196804 (2009).
- [131] A. Meszaros, D. Sadri and J. Zaanen, “*Parallel transport of electrons in graphene parallels gravity*”, Phys. Rev. B **82**, 073405 (2010).
- [132] J.D. Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, Wiley, Nova Iorque, 3^d ed. 1999.
- [133] A. Zazunov, A. Kundu, A. Hütem and R. Egger, “*Magnetic scattering of Dirac fermions in topological insulators and graphene*”, Phys. Rev. B **82**, 155431 (2010).

- [134] X.L. Yang, S.H. Guo, F.T. Chan, K.W. Wong and W.Y. Ching, “*Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory*” Phys. Rev. A **43**, 1186 (1991).
- [135] M.I. Katsnelson, F. Guinea and M.A.H. Vozmediano, “*Gauge fields at the surface of topological insulators*”, cond-mat. arXiv:1105.6132v2 (2011).
- [136] N. Engheta, “*Electrostatic “Fractional” Image Methods for Perfectly Conducting Wedges and Cones*”, IEEE Trans. Antennas Propagat., **44**, 1565 (1996).
- [137] A. Cano and I. Paul, “*Aharonov-Bohm oscillations in the local density of states*”, Phys. Rev. B **80**, 153401 (2009).
- [138] F. Juan, A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, “*Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets*”, Phys. Rev. B **76**, 165409 (2007).
- [139] F. Juan, A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano and A. Cano, “*Aharonov Bohm interference from local deformations in graphene*”, Nature Phys. **1** (2011).
- [140] B. Binengar, “*Relativistic field theories in three dimensions*”, J. Math. Phys. **23** 1511 (1982).
- [141] G.V. Dunne, “*Aspects of Chern-Simons Theory*”, arXiv:/hep-th/9902115v1 (1999).
- [142] V.M. Villalba and A.R. Maggiolo, “*Energy spectrum of a 2D Dirac electron in the presence of a constant magnetic field*”, Eur. Phys. J. B **22**, 31 (2001).
- [143] G.Y. Cho and J.E. Moore, “*Topological BF field theory description of topological insulators*”, Annals Phys. **326**, 1515 (2011).
- [144] P. Menotti, “*Some approaches to 2+1-dimensional gravity coupled to point-particles*”, arXiv:/hep-th/9511211v1 (1995).
- [145] M. Welling, “*Gravity in 2+1 dimensions*”, arXiv:/gr-qc/9412017v1 (1994)
- [146] S. Carlip, “*Lectures on (2+1)-dimensional Gravity*”, arXiv:/gr-qc/9503024v1 (1995).

- [147] H. C. Ohanian “*Gravitation and Spacetime*”, W.W. Norton & Company, (1976).
- [148] R.M. Wald “*General Relativity*”, University of Chicago Press, (1984).
- [149] A. Corichi and M. Pierri, “*Gravity and geometric phases*”, Phys. Rev. D **51**, 5870 (1995).