

DAYVISON NÍCOLAS SANTOS ALVES

EFEITOS DE PROXIMIDADE DE SISTEMAS MAGNÉTICOS EM
ISOLANTES TOPOLÓGICOS

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

Orientador: Jakson Miranda Fonseca

Coorientadores: Antônio Ribeiro de Moura
Joaquim Bonfim Santos Mendes

VIÇOSA – MINAS GERAIS
2022

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

T

A474e
2022
Alves, Dayvison Nicolas Santos, 1996-
Efeitos de proximidade de sistemas magnéticos em isolantes
topológicos / Dayvison Nicolas Santos Alves. - Viçosa, MG, 2022.
1 dissertação eletrônica (103 f.): il. (algumas color.).

Orientador: Jakson Miranda Fonseca.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2022.

Referências bibliográficas: f. 98-103.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2022.774>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Indução magnética. 2. Isolantes topológicos. 3. Superfícies
(Física). I. Fonseca, Jakson Miranda, 1984-. II. Universidade Federal
de Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em
Física. III. Título.

CDD 22. ed. 538.4

Bibliotecário(a) responsável: Euzébio Luiz Pinto CRB-6/3317

DAYVISON NÍCOLAS SANTOS ALVES

EFEITOS DE PROXIMIDADE DE SISTEMAS MAGNÉTICOS EM
ISOLANTES TOPOLÓGICOS

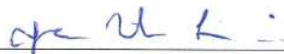
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 31 de março de 2022.

Assentimento:



Dayvison Nicolas Santos Alves
Autor



Jakson Miranda Fonseca
Orientador



“The ability to perceive or think differently is more important than the knowledge gained”

(David Bohm, quoted in New Scientist (February 1993), p. 42)

Agradecimentos

Primeiramente, à minha avó Cleyde, cuja atenciosidade para comigo no tempo que estive na UFV foi fundamental. A todos os meus amigos, em especial aos que conheci em Bom Jardim de Minas e às amizades construídas na UFV.

Ao professor Jakson Miranda Fonseca, pela orientação e auxílio no meu aprendizado e crescimento científico, aos coorientadores Antônio Ribeiro de Moura e Joaquim Bonfim Santos Mendes pelo apoio. Assim como a todos os professores e funcionários do Departamento de Física que foram um norte na minha vida acadêmica.

À UFV pela oportunidade de experienciar uma universidade tão acolhedora, tão bela e fascinante, cuja riqueza de diversidade social tanto quanto sua biodiversidade a torna um lugar único. Esse tempo em que estive na UFV me permitiram uma visão mais ampla de mundo e sociedade, cujo valores adquiridos levarei para sempre comigo.

À cidade de Viçosa por tudo que me proporcionou, pelo acolhimento e pelas pessoas fraternas dessa cidade que me cativou pela simplicidade e por tudo o que eu vivi nesse lugar.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), pelo apoio financeiro. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Aos Alojamentos da UFV e ao povo brasileiro, que apesar de todas as dificuldades, possibilitaram-me de estudar em uma universidade pública de qualidade e ser capaz de me manter economicamente nesse meio tempo que aqui estive.

A todas as pessoas que tive a honra e felicidade de conhecer nesses tempos que aqui estive e nos meses que precederam a conclusão deste trabalho e que, de alguma maneira, contribuíram para a sua realização.

Por último, não menos importante, agradeço à Fonte e aos Irmãos Maiores por todo amparo para comigo nessa jornada.

Resumo

SANTOS ALVES, Dayvison Nicolás, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, março de 2022. **Efeitos de Proximidade de Sistemas Magnéticos em Isolantes Topológicos.** Orientador: Jakson Miranda Fonseca. Coorientadores: Antônio Ribeiro de Moura e Joaquim Bonfim Santos Mendes.

Os efeitos de interação de sistemas magnéticos com os estados de superfície de isolantes topológicos são de grande interesse devido a apresentar características interessantes e de potencial aplicação tecnológica, tais como uma superfície metálica de condução helicoidal e um *bulk* isolante. O objetivo geral deste trabalho é a realização de uma revisão bibliográfica sobre alguns aspectos dos Isolantes Topológicos, os modelos e as características principais dos efeitos Hall clássico, quântico, quântico de spin e isolantes topológicos 3D; com foco no efeito magneto-elétrico topológico e suas consequências nos efeitos de interação com os estados de superfície do isolante topológico. Por fim, como alguns sistemas magnéticos se acoplam nos estados de superfície levando a comportamentos exóticos de condução, quebras de simetria, excitações de quasi-partículas e aberturas locais de gap de energia para os estados de superfície com uma quantização Hall semi-inteira devido a interação de impurezas magnéticas, vórtices, skyrmions, ferromagnetos e paredes de domínio. Espera-se que as pesquisas em isolantes topológicos possam ser usadas em novas gerações de dispositivos eletrônicos, circuitos fotônicos e spintrônicos, transistores, aplicações em conjunto com supercondutores ou em computadores quânticos.

Palavras-Chave: Isolantes topológicos. Estados de superfície. Magnetismo. Efeito magneto-elétrico topológico.

Abstract

SANTOS ALVES, Dayvison Nicolás, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, March, 2022. **Proximity Effects of Magnetics Systems in Topological Insulators.** Adviser: Jackson Miranda Fonseca. Co-advisers: Antônio Ribeiro de Moura and Joaquim Bonfim Santos Mendes.

The interaction effects of magnetic systems with the surface states of topological insulators are of great interest due to their interesting characteristics and potential technological application, such as a helically conductive metallic surface and an insulating *bulk*. The general objective of this work is to carry out a Literature review on some aspects of Topological Insulators, the models and main characteristics of the classical, quantum, quantum spin Hall effects and 3D topological insulators; focusing on the topological magnetoelectric effect and its consequences on the interaction effects with the surface states of the topological insulator. Finally, how some magnetic systems couple to the surface states leading to exotic conduction behaviors, symmetry breaks, quasi-particle excitations and local gap energy openings for surface states with a half-integer Hall quantization due to the interaction with magnetic impurities, vortices, skyrmions, ferromagnets and domain walls. It is expected that research on topological insulators can be used in new generations of electronic devices, photonic and spintronic circuits, transistors, applications in conjunction with superconductors or in quantum computers.

Keywords: Topological insulators. Surface states. Magnetism. Topological magneto-electric Effect.

Lista de Figuras

1	Polaridade da <i>fem</i> Hall em diferentes portadores de carga livres - (a) negativos, (b) positivos ^[9]	17
2	Resistividade Hall clássica (R_H) e resistividade longitudinal (R_L), dados em função do campo magnético B	18
3	Quantização de Landau: para $B = 0$ temos um espectro com estados contínuos, onde os níveis de energia demarcados irão corresponder aos níveis de Landau completamente preenchidos; para $B_z > 0$ surge a discretização uniforme dos estados para um sistema sem espalhamento e alargamento dos níveis de Landau em estados localizados e estendidos para um sistema com espalhamento ^[14]	21
4	Representação da quebra da simetria de translação contínua na transição de fase da água líquida para o seu estado sólido (representado no floco de neve), com simetria de translação discreta. Acima da temperatura crítica, o parâmetro de ordem local varia continuamente com a temperatura, com exceção do ponto crítico na temperatura de transição T_c , onde a simetria é quebrada e ocorre a transição de fase.	23
5	Esquema da transição BKT entre pares vortíce anti-vortíce.	26
6	Sistema ferromagneto	28
7	Sistema antiferromagneto	28
8	Homeomorfismo entre uma xícara e uma rosquinha.	31
9	(a)-(c) Estado Isolante, (d)-(f) Estado HQ. (b) Exemplo de uma estrutura de bandas de um isolante, (e) nível de Landau visto como estrutura de bandas.(c) Laranja (esfera) de <i>genus</i> $g = 0$, (f) rosquinha (toro geométrico) de <i>genus</i> $g = 1$. ^[35]	32
10	<i>Winding number</i> para rotações em relação a origem. (a): Ferromagneto, spins alinhados paralelamente; (b): Vórtice, spins realizam uma rotação no sentido horário ao longo da origem; (c): Anti-vórtice, spins realizam uma rotação no sentido anti-horário ao longo da origem; (d): Vórtice de ordem superior, spins realizam duas rotações ao longo da origem ^[38]	34
11	Diferentes espaços topológicos (esfera e toro) de mesmo grupo de homotopia, mas de classes homotópicas diferentes.	35
12	Representação de um semiconductor do tipo MOSFET.	36

13	Quantização dos níveis de energia de Landau, no qual a energia entre dois níveis sucessivos é dado por $E = \hbar\omega_c$, em que o efeito Zeeman desfaz a degenerescência entre os graus de liberdade do spin <i>up</i> e <i>down</i> e cada nível contenha dois subníveis de energia com gap de $\Delta_Z = g * \mu_B B_\perp $ [15].	38
14	(a) interface isolante trivial e efeito Hall Quântico, com condução quiral dos elétrons nos estados de borda; (b) representação dos níveis de Landau vistos como bandas de energia com o estado de borda conectando as bandas de valência e condução[35].	39
15	Resistividade Hall e Longitudinal dadas em função do campo magnético para o efeito HQ em um gás de elétrons a baixas temperaturas e forte intensidade de campo magnético, em que N caracteriza cada nível quantizado, apresentando os platôs quantizados na resistência Hall e na resistência longitudinal apresentando o efeito de Shubnikov-de Haas, que se anula nos platôs[15].	40
16	Resistência Hall e Longitudinal dadas em função do campo magnético para o efeito Hall Quântico Fracionário, em que N caracteriza cada nível quantizado[15].	42
17	Analogia entre o transporte de cargas nas bordas no efeito HQ e HQS, através das simbólicas equações $2 = 1$ (movimento para frente)+1 (movimento para trás) para o HQ, enquanto $4 = 2 + 2$ no HQS leva em conta a corrente de spin[1].	43
18	(a) Esquematização da estrutura tipo sanduíche de HgTe e CdTe; (b) Espessura d em função da inversão de bandas, sendo s o orbital dos elétrons de condução e p o orbital dos elétrons de valência, com uma inversão dos orbitais do HgTe para uma espessura maior que $d \approx 6,3nm$ [35].	44
19	Estrutura de bandas mostrando a dispersão para os pontos degenerados de Kramers $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi$, para o caso (a) em que a energia de Fermi cruza os estados de superfície em um número par e em (b) ímpar. No qual o último caso leva a estados de borda metálico protegido topologicamente[35].	46
20	Um elétron refletido pela impureza representada por \times , muda o sentido de rotação por uma fase completa de 2π do autoestado da função de onda, devido a suas duas possíveis rotações de spin. a) contornando no sentido horário por uma rotação de π do spin, b) contornando no sentido anti-horário por uma rotação de $-\pi$ do spin; sendo as duas possibilidades de retroespalhamento[49].	47
21	Representação dos círculos de Fermi em (a) para um isolante topológico fraco e em (b) para um forte. Em (c) temos um cone de Dirac com um único ponto de Dirac exemplificando o caso mais simples de um isolante topológico forte[35].	50

22	Inversão entre a banda de condução L_s e valência L_a do $Bi_{1-x}Sb_x$ dependente da concentração de x . (a) estado semimetálico $x = 0$, (b) estado isolante topológico $0,07 < x < 0,22$, (c) estado semimetálico $x = 1$ [35].	51
23	Medidas ARPS para isolantes topológicos de primeira (a) e segunda (b) geração. (a) Estados de superfície do $Bi_{0,9}Sb_{0,1}$ cruzando o nível de Fermi 5 vezes entre $\bar{\Gamma}$ e \bar{M} ; (b) Medidas para Bi_2Se_3 ; [A] bandas de condução (BCB) e de valência (BVB) do <i>Bulk</i> , com os estados de superfície (SSB) e o ponto de Dirac indicados; [B] camadas de estados com mesma energia; [C] estrutura de bandas evidenciando o cone de Dirac e o gap de energia do <i>bulk</i> [65, 69].	52
24	Estrutura do trans-poliacetileno no modelo SSH para o estado fundamental com dois casos de dimerização dados por (a) $\delta t > 0$ e (b) $\delta t < 0$, e o correspondente vetor unitário $\vec{d}(k)$ no espaço de momento com $k = 0 \rightarrow 2\pi$ para (c) no qual não varre o centro de ângulo sólido e (d) no qual a rotação de 2π leva à uma fase de Berry [51].	55
25	Diferentes dispersões dadas em função de (a) $v = 1, w = 0$; (b) $v = 1, w = 0, 6$; (c) $v = w = 1$; (d) $v = 0, 6, w = 1$; (e) $v = 0, w = 1$; e suas respectivas fases em $\vec{d}(k)$ com (f, g) isolante trivial; (h) condutora e (i, j) isolante topológico[76].	55
26	(a) rede hexagonal contendo os sítios A e B da célula primitiva (hexágono laranja), e as interações de segundos vizinhos (tracejado em vermelho), ao canto tem a rede recíproca com os pontos de simetria. (b) estrutura de bandas para $t' = 0$, mostrando seis cones de Dirac[81].	57
27	(a) cone de Dirac para o grafeno, podendo ou não apresentar a simetria \mathcal{T} . (b) violação da simetria \mathcal{P} no grafeno, levando à um estado de isolante trivial com um gap de $2 m_{\mathcal{P}} $ no espectro de energia[51].	59
28	(a) Estrutura de bandas do <i>Bulk</i> para o CdTe e HgTe. (b) Poço quântico de HgTe com barreira de CdTe, onde temos a inversão das sub-bandas $E1$ e $H1$, devido ao aumento da largura do poço quântico[4].	61
29	Níveis de energia das sub-bandas E_n e H_n em função da espessura do poço quântico d , sendo o ponto crítico $d_c \sim 6,3nm$ [86].	61
30	(a) interface isolante trivial e efeito Hall Quântico de Spin, com condução helicoidal dos elétrons nos estados de borda; (b) bandas de energia com os estados de borda conectando as bandas de valência e condução, insensíveis a desordens não magnéticas[35].	64

31	(a) Cone de Dirac com os spins do estado de borda próximos do ponto Γ , com helicidade dada pelos sentidos contrários para banda de condução e valência; (b) Textura de spin para os estados de superfície no espaço de momento (no eixo- z o vermelho indica spin <i>up</i> e azul spin <i>down</i> , com as setas correspondendo a orientação dos spins no plano- xy e as linhas pretas os contornos de mesma energia) ^[92]	66
32	Isolante topológico cilíndrico coberto por filme fino magnético na área lateral, de magnetização perpendicular a superfície. (a) a aplicação de um campo elétrico \vec{E} externo induz uma resposta topológica magneto-elétrica de magnetização \vec{M}_t ; (b) a aplicação de um campo magnético externo variável induz uma resposta topológica magneto-elétrica de polarização elétrica \vec{P}_t ^[58]	69
33	Carga imagem e monopolo induzidos no isolante topológico com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície, devido ao campo elétrico de uma carga q de prova (pontual), sendo vermelho as linhas de campo elétrico, azul do magnético e preto sendo \vec{J}_\odot no plano- xy (imagem à esquerda); Sistema de dyon com estatística fracionária induzida pelo efeito imagem de monopolo magnético (imagem à direita) ^[93]	71
34	Efeito Witten apresentando uma carga de prova q_m de monopolo magnético no interior de um isolante topológico ferromagnético com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície, apresentando uma carga elétrica imagem que se comporta com decaimento usual de $1/r^2$ ^[103]	73
35	Rotação θ_{topo} no plano de polarização da luz transmitida do efeito Faraday na superfície de um isolante topológico revestido com um filme fino magnético (imagem à esquerda); (imagem à direita) ^[2, 58, 106]	75
36	Ilustração de um filme fino ferromagneto com momento $\vec{m}(m_x, m_y, m_z)$, acoplado na superfície de um isolante topológico ^[51]	77
37	Ferromagnetos acoplados a superfície de um isolante topológico. (a) com uma parede de domínio devido a magnetizações opostas, gerando uma condução quiral nos estados de borda; (b) transporte de corrente na interface entre ferromagnetos $F1(\vec{m}_1)$ e $F2(\vec{m}_2)$ ^[2, 51, 109]	78
38	Mapa de condutância em função das coordenadas polares da magnetização de $F1$. (a, c) temos $m_2 = 0$; (b, d) temos $m_2 = \sqrt{0,9}E$. Sendo que em (a, b) temos uma junção n-n com $V = 0$ e em (c, d) uma junção p-n com $V = 2E$ ^[109] . . .	80

39	Densidade local de estados plotado com $r_0 = 13nm$ e $M_0 = 50meV$. Dado em função da distancia r da impureza para elétrons com energia $E = 30meV$ (linhas pretas) e $E = 70meV$ (linhas azuis) (imagem à esquerda); Dado em função da energia E para distância $r = 0$ (região da impureza magnética) (linhas azuis) e $r = 20nm$ (região distante de r_0) (linhas vermelhas) (imagem à direita) ^[117]	83
40	Densidade local de estados de spin plotado com $r_0 = 13nm$, $M_0 = 50meV$ e $E = 10meV$. Onde as setas indicam a componente de spin no plano- xy e a mudança de coloração indicam a componente de spin no eixo- z . Para uma impureza magnética na direção z (imagem à esquerda); Para uma impureza magnética na direção y (imagem à direita) ^[117]	84
41	(a) Estados de superfície topologicamente protegidos contra impurezas não-magnéticas; (b) ARPES demonstrando um deslocamento no nível de Fermi devido a dopagem de 10% de impureza não magnética $[(Bi_{0.9}Tl_{0.1})_2Se_3]$; (c) Abertura de um gap de energia devido a impurezas magnéticas; (d) ARPES demonstrando a abertura de gap devido a dopagem de impurezas magnéticas para 12% de $[(Bi_{0.88}Fe_{0.12})_2Se_{3.7}]$ e 16% de $[(Bi_{0.84}Fe_{0.16})_2Se_{3.7}]$ ^[69]	85
42	Campo de magnetização \vec{M} (setas pretas) com vorticidade $q_v = 1$ para: vórtice comum ou rotacional de sentido anti-horário com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = \pi/2$ (imagem à esquerda); vórtice radial com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = 0$ (imagem à direita) ^[6]	87
43	Estados de Férmions de modo zero na superfície do isolante topológico, concentrados em uma região de raio r_0 . Alinhados com a magnetização do vórtice de sentido horário (imagem à esquerda); alinhados com a magnetização do vórtice de sentido anti-horário (imagem à direita) ^[6]	89
44	(a) Configuração de spins para um skyrmion do tipo Bloch com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = \pi/2$; Configuração de spins para um skyrmion do tipo Néel com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = 0$ ^[124]	91
45	(a) plot de uma rede de skyrmions do tipo Bloch com vetores de Bravais \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , para parâmetros $\alpha = 0,5$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,49$. Com a coloração correspondendo a $M_z(r) = -1 \rightarrow +1$ e os vetores em preto aos spins no plano; (b) magnetização em função da distância para diferentes α , sendo o ponto laranja correspondente ao ponto onde ocorre a mudança de sinal na magnetização na distância de raio R do skyrmion ^[123]	92

46	Estrutura de bandas para skyrmions do tipo Bloch acoplado a superfície de um isolante topológico e sua respectiva densidade de estados (DOS), com parâmetros fixos $J = 3$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,49$. (a) para $R/a = 0,28$, apresentando abertura de gap; (b) para $R/a = 0,37$, sem gap de energia (circulado); (c) para $R/a = 0,44$, apresentando abertura de gap na banda primária e ausência de gap nas bandas secundárias e terciárias (circulado) ^[123]	93
47	Estrutura de bandas para skyrmions do tipo Néel acoplado a superfície de um isolante topológico, com parâmetros fixos $J = 3$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,3$, com todos apresentando abertura de gap. (a) para $R/a = 0,20$, com ausência de gap nas bandas secundárias e terciárias (circulado); (b) para $R/a = 0,25$, com número de Chern não trivial $C_{+3} = 2$ cuja banda eventualmente irá fechar o gap com o aumento de R/a ; (c) para $R/a = 0,29$, limite em que $R \rightarrow R_0$ com simetria Ξ ^[123]	94

Sumário

1	Introdução	14
2	Introdução aos Isolantes Topológicos	16
2.1	Efeito Hall Clássico	16
2.2	Níveis de Landau	19
2.3	Simetria e Topologia na Matéria Condensada	21
2.4	Invariantes Topológicos	30
2.5	Efeito Hall Quântico	36
2.6	Efeito Hall Quântico de Spin	41
2.7	Isolantes Topológicos Tridimensionais	49
3	Modelos e Efeitos para Sistemas Topológicos	53
3.1	O Modelo SSH	53
3.2	O Modelo de Haldane	56
3.3	O Modelo BHZ	59
3.4	Estados de Superfície do Isolante Topológico	63
3.5	Efeito Magneto-elétrico Topológico	66
3.6	Efeito Kerr Topológico e Rotação de Faraday	73
4	Soluções Magnéticas Acopladas a Superfície de Isolantes Topológicos	77
4.1	Ferromagneto	77
4.2	Impureza Magnética Isolada	80
4.3	Vórtice	85
4.4	Skyrmion	90
5	Conclusões e Perspectivas	95
	Referências bibliográficas	98

1 Introdução

A maneira mais comumente utilizada de se classificar diferentes fases da matéria se baseia em saber quais simetrias elas quebram. Por exemplo, um material que na fase líquida possui simetria de translação contínua passa a ter uma simetria de translação discreta ao se encontrar em sua fase sólida. Essa quebra de simetria evidencia uma transição de fase da matéria, teoria formulada em 1937 por Landau, conhecida como Paradigma de Landau (teoria de Landau das transições de fases), que até o fim da década de 60 era efetiva para descrever todas as transições de fase conhecidas, se baseando somente na quebra de simetria espontânea entre os estados^[1]. Contudo, a partir da década de 70 foram descobertos novos estados quânticos da matéria que não se encaixam em nenhuma descrição pelo paradigma de Landau; Entre eles o efeito Hall Quântico (HQ), que demonstra a inexistência de qualquer quebra de simetria espontânea além da quebra da simetria de reversão temporal, que não é caracterizada como um parâmetro de ordem local e não apresentando nenhuma quebra espontânea entre os estados. Esse estado da matéria apresenta um *bulk* (interior) isolante e nas bordas apresenta uma condução Hall quantizada que é definida apenas pelos parâmetros topológicos do *bulk*. Tais descobertas tornaram possível a compreensão de novos estados da matéria que dependem somente da topologia do sistema, abrindo os campos de estudo de parâmetros de ordem topológica e da teoria topológica de campos em matéria condensada^[2].

Nas décadas seguintes novos estados de matéria de classe topológica foram descobertos, tais como os isolantes topológicos bidimensionais (ITB's), conhecidos por apresentarem efeito Hall Quântico de Spin (HQS), sendo previstos teoricamente em 2005^[3] no grafeno, apresentando baixo acoplamento spin-órbita e em 2006^[4] em poços quânticos de Telureto de Mercúrio (HgTe) com forte acoplamento spin-órbita fundamental para o estado topológico, culminando na sua observação experimental nos mesmos poços quânticos de HgTe em 2007^[5]. O efeito HQS apresenta uma considerável diferença em relação ao efeito HQ, por não quebrar a simetria de reversão temporal.

Este trabalho tem o objetivo de realizar uma revisão bibliográfica sobre as previsões e descobertas dos isolantes topológicos, desde o clássico efeito Hall, Hall quântico, Hall quântico de Spin, até os isolantes topológicos tridimensionais. Buscando a compreensão dos fenômenos topológicos e as características principais de cada efeito, tendo como foco a discussão do efeito magneto-elétrico topológico, suas consequências nos efeitos de interação com os estados de superfície do isolante topológico. Por fim, como alguns sistemas magnéticos se acoplam com os estados de superfície levando a comportamentos exóticos de condução, quebras de simetria, excitações de quasi-partículas, assim como aberturas locais de gap de energia para os estados de superfície com uma quantização Hall semi-inteira, devido a

interação de impurezas magnéticas, vórtices, skyrmions, ferromagnetos e paredes de domínio. Tais acoplamentos são descritos em sistemas de matéria condensada por Hamiltonianas efetivas, considerando excitações de baixa energia (longos comprimentos de onda).

Uma análise da interface dos estados de superfície do isolante topológico tridimensional com um filme fino possuindo uma configuração de magnetização (ferromagnetos, vortices, skyrmions, etc...) permite obter a partir de uma descrição dos estados de superfície, características tais como dispersão nos níveis de Landau, quebras de simetria, a existência da abertura local ou geral de um gap de energia nos estados de borda do material, entre outras características. Para isso consideramos os efeitos de acoplamento de troca entre os momentos magnéticos e os spins dos portadores de carga na superfície do isolante topológico, considerando que são descritos por uma Hamiltoniana de superfície de baixas energias, que capta as principais simetrias e propriedades fundamentais na descrição dos estados. As interações devido à interface podem induzir, por exemplo, um estado de condução quiral na superfície do isolante topológico, levando à uma condutividade Hall semi-inteira causada por uma configuração ferromagneto^[2]; podem induzir estados ligados, confinados e de modo zero carregados causados por uma configuração do tipo vórtice^[6]; ou mesmo apresentarem características de condução únicas devido uma corrente de tunelamento na parede de domínio ferromagnética com condutividade Hall, associadas ao transporte de cargas na superfície de isolantes topológicos^[7].

Os isolantes topológicos bidimensionais e tridimensionais possuem intrigantes propriedades, tal como o *bulk* isolante, uma superfície condutora protegida pela simetria de reversão temporal e estados de condução helicoidais com corrente efetiva de Spin conjuntamente associada à uma condutividade Hall nula, tendo grandes perspectivas de aplicações tecnológicas, tais como transistores, circuitos fotônicos, spintrônica e computação quântica. Quando levamos em consideração também a interação de superfície com sistemas magnéticos e o efeito magneto-elétrico topológico, abre-se uma nova gama de propriedades que podem ser exploradas para futuras aplicações tecnológicas, incluindo transistores magneto-elétricos, maior controle dos sistemas magnéticos e também contribuições à spintrônica, magnônica, fotônica, entre outras^[2].

2 Introdução aos Isolantes Topológicos

2.1 Efeito Hall Clássico

O conhecido efeito Hall Clássico, descoberto pelo físico estadunidense Edwin Hall em 1879^[8], permite determinar propriedades dos portadores de carga livres em um material, tais como a concentração de portadores de carga e velocidade de arraste do elétron v_d em metais. Entretanto, a teoria apresenta um desvio em relação às medições experimentais devido a desconsideração dos efeitos das interações quânticas dos elétrons e dos íons da rede, com uma razão de $R_t/R_e \sim 1,36$ entre a teoria R_t e o experimento R_e para o cobre, por exemplo^[9].

Uma forma simples de compreender o efeito Hall consiste em analisar, por exemplo, o caso de um material condutor transportando uma densidade de corrente $\vec{J} = |J_x|\hat{i}$ no sentido x positivo. Ao aplicarmos um campo magnético perpendicular ao sentido de corrente, $\vec{B} = |B_y|\hat{j}$, os portadores de carga do material irão sofrer uma força magnética de Lorentz $\vec{F} = |F_z|\hat{k}$ e dessa forma se acumulando no sentido z na extremidade superior do material. O acúmulo de portadores de carga irá gerar uma diferença de potencial elétrico conhecido como *fem* Hall, cuja polaridade da diferença de potencial irá depender unicamente dos portadores de carga serem positivos ou negativos, tal como exemplificado na Figura 1. A intensidade máxima da diferença de potencial é obtida quando a força elétrica $\vec{E} = |E_e|\hat{k}$ gerada pelo campo Hall se iguala a força magnética do campo aplicado.

Muitos sensores de campo magnético funcionam utilizando o efeito Hall clássico devido a *fem* Hall. Também é possível descobrir os portadores de carga que se deslocam no material por meio do sentido da corrente Hall. Tanto que logo após a descoberta do efeito Hall, verificou que em alguns materiais tais como semicondutores, os portadores de carga demonstram ser positivos, apesar de sabermos que não são os prótons que estão se deslocando no material, o que mais tarde contribuiu para o entendimento de *condução por buracos* em que a ausência de uma carga elétrica negativa no semicondutor é equivalente à uma carga elétrica positiva no buraco correspondente onde falta o elétron, uma quasipartícula que se comporta efetivamente como um portador de carga positiva^[9].

Considerando um sistema bidimensional de gás de elétrons, podemos descrever a força sofrida por um elétron de momento $\vec{P} = (p_x, p_y)$ pela seguinte equação de movimento:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = -e \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{m_b} \times \vec{B} \right) - \frac{\vec{P}}{\tau}, \quad (1)$$

em que levamos em conta a força de Lorentz para um elétron de carga $q = -e$, e a relaxação na

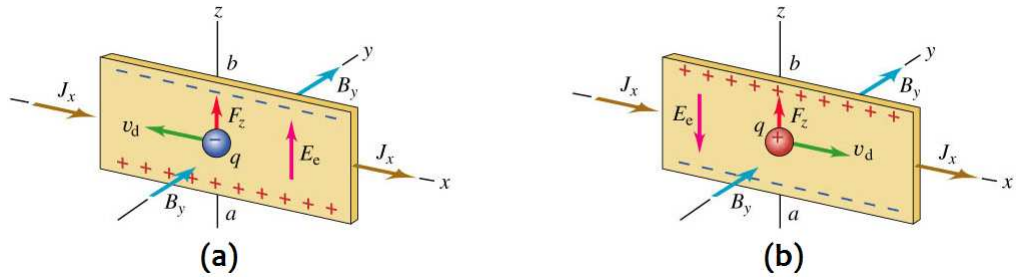


Figura 1: Polaridade da *fem* Hall em diferentes portadores de carga livres - (a) negativos, (b) positivos [9].

difusão do elétron por impurezas, sendo \vec{E} e \vec{B} o campo elétrico e magnético respectivamente, m_b a massa efetiva do elétron ou buraco e τ caracteriza o tempo de relaxação.

O modelo de Drude para condução elétrica em metais permite se entender o efeito Hall de forma quantitativa mais facilmente, em que a condutividade de Drude σ_0 é representada pela resistividade de Drude ρ_0 dada por:

$$\sigma_0^{-1} = \rho_0 = \frac{m_b}{n_b e^2 \tau}, \quad (2)$$

em que n_b é a densidade numérica de elétrons ou buracos. Ao considerarmos no caso da equação (1) um campo magnético na direção z positivo e levarmos em conta o modelo de Drude, podemos obter algumas propriedades do sistema. Características tais como a condutividade ou resistividade, obtidas a partir da solução estática da equação de movimento, isso é, quando $d\vec{P}/dt = \vec{0}$, de modo que:

$$\begin{aligned} \sigma_0 E_x &= -en_b \frac{p_x}{m_b} - e^2 n_b \tau B \frac{p_y}{m_b^2} \\ \sigma_0 E_y &= e^2 n_b \tau B \frac{p_x}{m_b^2} - en_b \frac{p_y}{m_b} \end{aligned} \quad (3)$$

Podemos reescrever a Lei de Ohm $\vec{E} = \rho \vec{J}$ de forma tensorial, em que ρ é o tensor de resistividade e \vec{J} a densidade de corrente. Considere a equação (3) dada em em termos da densidade de corrente, lembrando que:

$$\vec{J} = -en_b \frac{\vec{P}}{m_b}, \quad (4)$$

de modo que obteremos a nossa matriz na seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m_b}{n_b e^2 \tau} & \frac{B}{en_b} \\ \frac{-B}{en_b} & \frac{m_b}{n_b e^2 \tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_L & -R_H \\ R_H & R_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}, \quad (5)$$

em que $R_L = \rho_0 = m_b/n_b e^2 \tau$ é a resistividade longitudinal e $R_H = -B/en_b$ é a resistividade Hall. Sendo as componentes J_x ou J_y obtidas quando consideramos a aplicação de uma diferença de potencial no eixo- x ou eixo- y , de modo que uma das componentes do campo elétrico aplicado seja nula. Observe que em relação ao campo magnético B , R_L é constante e R_H cresce linearmente, conforme o gráfico da Figura 2.

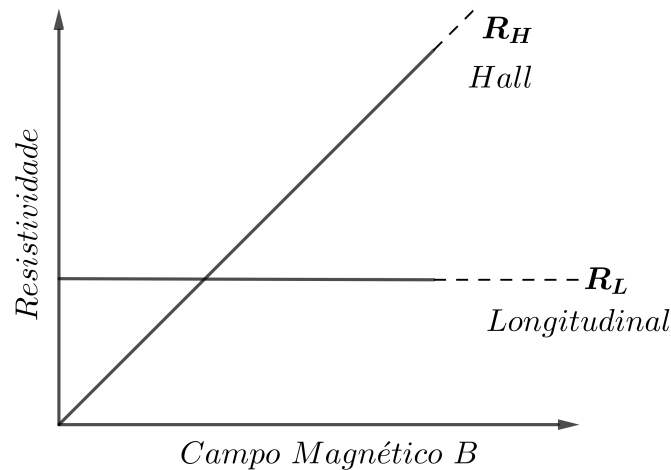


Figura 2: Resistividade Hall clássica (R_H) e resistividade longitudinal (R_L), dados em função do campo magnético B .

É importante notar que em 3D a relação entre a resistência R e resistividade ρ é dada por $R = \rho L_{\parallel}/A_{\perp}$, em que o comprimento L_{\parallel} é paralelo ao sentido da corrente e a área A_{\perp} é perpendicular. No nosso modelo levamos em consideração um gás de elétrons bidimensional e portanto confinado em um plano, de modo que em vez de uma área A_{\perp} teremos uma relação com o comprimento W_{\perp} perpendicular ao sentido da corrente. De fato, somente para o caso em que o fator $f(L_{\parallel}/W_{\perp})$ coincida de $L_{\parallel} = W_{\perp}$, que obteremos $R = \rho$. Na corrente Hall, assim como na corrente longitudinal, a resistência só irá coincidir com a resistividade no caso em que a geometria do sistema implicar no fator $f(L_{\parallel}/W_{\perp}) = 1$.

No tensor de resistividade da equação (5), devemos levar em consideração que os resultados de R_L constantes em relação ao campo magnético aplicado são feitos levando em conta um campo magnético de baixa intensidade de forma a desconsiderar o efeito de Shubnikov-de Haas^[10]. Esse exótico efeito descoberto em 1930, demonstra que a resistividade longitudinal tende a oscilar em função do campo magnético quando ele atinge um valor crítico B_c muito alto, cuja causa está relacionada à energia de quantização dos níveis de Landau no gás de elétrons bidimensional sob efeito de um intenso campo magnético $B \geq B_c$. Esse efeito para intensos campos magnéticos foi a primeira pista precursora da descoberta do efeito HQ.

2.2 Níveis de Landau

A compreensão da quantização de Landau^[11] é fundamental para o efeito HQ, teorizada em 1930 no estudo de diamagnetismo de metais através da quantização dos níveis de energia de um gás de elétrons livres. Através da equação de Schrödinger podemos expressar os efeitos quânticos devido à presença de um campo magnético interagindo em um gás de elétrons livres em um sistema fracamente interagente, desconsiderando a interação entre os elétrons. Sendo assim, a quantização de Landau se expressa pela seguinte Hamiltoniana para um elétron:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{\pi}^2}{2m_e}; \quad \vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}, \quad (6)$$

em que c é a velocidade da luz, \vec{p} o momento associado ao elétron e \vec{A} é o potencial vetor do campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, adotado perpendicular ao plano x - y . Foi desconsiderado o termo devido ao spin do elétron, $-\frac{e}{m_e c}(\vec{S} \cdot \vec{B})$, pois resultaria somente em um deslocamento dos níveis de energia em uma constante dada por $\pm \frac{e}{m_e c}B$.

Substituindo o vetor \vec{p} pelo operador momento linear $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ na Hamiltoniana da equação (6) e desconsiderando outros potenciais escalares, temos então a seguinte equação de Schrödinger:

$$\frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 \psi = E\psi. \quad (7)$$

Escolhendo o campo aplicado uniformemente no sentido positivo do eixo- z e considerando a liberdade na transformação de calibre para o potencial vetor, sendo que essa transformação não altera as propriedades físicas da Hamiltoniana, iremos optar pelo calibre na seguinte forma:

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

de forma que se pode reescrever a equação (7) como:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\left(-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{eBy}{\hbar c} \right)^2 - \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 - \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right] \psi = E\psi. \quad (9)$$

Sabendo que os operadores momento no eixo- x e eixo- z comutam com a Hamiltoniana na Equação (9), então podemos substituir os operadores $p_x = -i\hbar\partial_x$ e $p_z = -i\hbar\partial_z$ pelo seus autovalores dados por $\hbar k_x$ e $\hbar k_z$, respectivamente. Lembrando também que a frequência ciclotrônica é dada por $\omega_c = \frac{e|B|}{m_e c}$, podemos então manipular a equação de modo a obter uma equação da seguinte forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m_e \omega_c^2}{2} \left(y + \frac{\hbar c k_x}{eB} \right)^2 \right] \psi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \right) \psi, \quad (10)$$

percebemos que a equação (10) possui a mesma estrutura do Oscilador Harmônico Quântico Simples, exceto pelo deslocamento no potencial dado por $y_0 = -\frac{\hbar c k_x}{eB}$. Esse deslocamento no potencial não interfere na solução de energia da Equação de Schrödinger, que será idêntica a do Oscilador Harmônico Quântico acrescida à energia do momento no eixo- z , dada por:

$$\epsilon_{n,k_z} = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}. \quad n = 0, 1, 2, 3... \quad (11)$$

Temos que a energia dada na equação (11) não depende do número quântico k_x e k_y , o que significa que os estados de energia possuem degenerescência. Esse resultado da energia quantizada para k_z fixo, demonstra que os elétrons confinados no sistema só poderão ocupar órbitas que possuem valores discretos de energia, sendo cada conjunto de funções de onda na Equação de Schrödinger com valores iguais de n , denominados Níveis de Landau. Para melhor visualizar, podemos considerar o fato da quantização de Landau também resultar na quantização da densidade de estados, Figura 3, tendo relação direta com fenômenos tais como o efeito de Haas-Van Alphen^[12], Shubnikov-de Haas^[10] e Hall Quântico^[13].

Na ausência de campo magnético teremos uma densidade de estados contínua (desconsiderando os efeitos menos relevantes da discretização devido a estrutura cristalina do material). Porém ao aplicar um campo magnético suficientemente alto, surge a discretização dos estados, sendo uniforme para um sistema sem espalhamentos. Para um sistema que possui temperatura não nula e defeitos estruturais o espalhamento gera um alargamento nos níveis de Landau em estados localizados e estendidos, sendo que os estados localizados não conduzem e os estados estendidos conduzem.

A função de onda da Equação de Schrödinger (10) pode ser expressa como:

$$\psi = \psi_n(x, y, z) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m_e \omega_c}{\pi \hbar}} e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2l_B^2}} H_n \left(\frac{y-y_0}{l_B} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3... \quad (12)$$

sendo H_n os polinômios de Hermite e $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ o comprimento magnético que corresponde ao raio da órbita ciclotrônica no modelo clássico, em geral na ordem de 5-10 nm e que não depende de parâmetros do material^[15].

Somente podemos descrever para um gás de elétrons em termos de Níveis de Landau, quando a interação elétron-elétron for desprezível. Também temos que os efeitos associados aos Níveis de Landau somente podem ser observados quando os efeitos de interação térmica

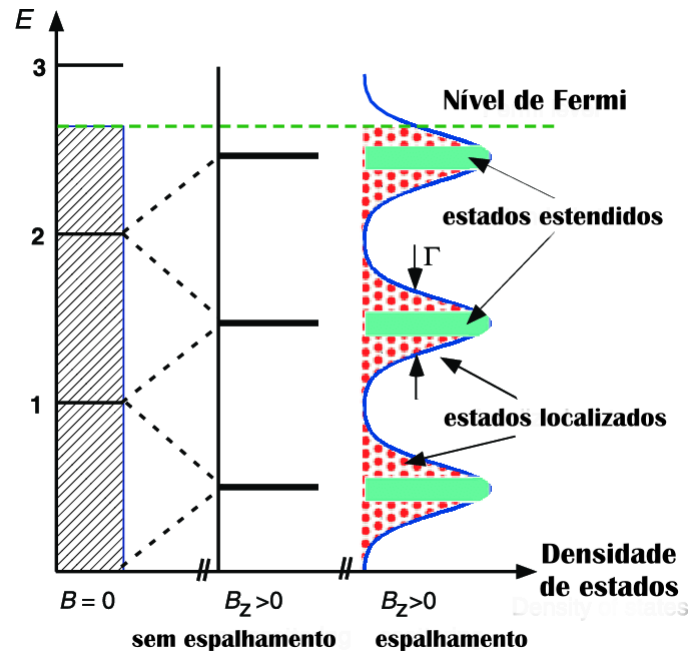


Figura 3: Quantização de Landau: para $B = 0$ temos um espectro com estados contínuos, onde os níveis de energia demarcados irão corresponder aos níveis de Landau completamente preenchidos; para $B_z > 0$ surge a discretização uniforme dos estados para um sistema sem espalhamento e alargamento dos níveis de Landau em estados localizados e estendidos para um sistema com espalhamento^[14].

são menores que os efeitos quânticos associados à separação entre os níveis de Landau, no qual os efeitos se tornam relevantes quando $k_B T \ll \hbar \omega_c$, em que k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Por esses motivos, para que se possa evidenciar a fase topológica do efeito Hall Quântico, von Klitzing et al. em 1980 necessitaram da aplicação de um campo magnético extremamente alto ($\approx 18T$) e de um sistema em temperatura próxima do zero absoluto ($\approx 1,5K$), para que se pudesse evidenciar os efeitos quânticos associados aos níveis de Landau^[13].

2.3 Simetria e Topologia na Matéria Condensada

Além do estudo da quantização dos níveis de energia do gás de elétrons livres, o físico Lev Davidovich Landau contribuiu significativamente na física de matéria condensada, especialmente nos estudos de hélio líquido^[16], sendo por isso ganhador do Nobel de física de 1962^[17]. Aos seus estudos estão atribuídos dois paradigmas tradicionais na física da matéria condensada, a teoria de Landau dos Líquidos de Fermi^[18] e a teoria de Landau das Transições de Fases e quebra de simetria^[19].

Teoria de Landau dos Líquidos de Fermi: formulada em 1956^[18], mostra que no estudo dos elétrons em metais é possível simplificar diversas interações no sistema bastando considerar um modelo semelhante ao de um gás de elétrons livres. O líquido de Fermi consiste então em um gás de quasi-partículas com propriedades semelhantes ao dos elétrons, porém com massa e momento magnético efetivo modificados. A descrição dos portadores de carga através dos líquidos de Fermi não interagentes mantém a conservação da carga, spin e momento associado ao elétron, renormalizando suas propriedades dinâmicas associadas ao momento magnético efetivo e a massa. Essa modificação no sistema de gás de elétrons livres permite através de aproximações de muitos corpos dos auto-estados, simular efeitos de interação e repulsão entre os elétrons e a rede. Tal aproximação leva em consideração baixa temperatura e outras escalas de energia reduzidas, consistindo em um gás não interagente de quasi-partículas, no qual os efeitos do movimento dos elétrons e repulsão são incluídos no aumento da massa do elétron, comumente chamada de massa efetiva que se difere da massa de repouso. Assim, um comportamento gerado por excitações coletivas entre os elétrons e a rede se torna reduzido ao comportamento de uma quasi-partícula isolada, um gás de elétrons interagente em um metal se reduz a um gás de elétrons não interagentes de massa efetiva, cuja quasi-partícula pode ser milhares de vezes maior que a massa de repouso do elétron.

Teoria de Landau das Transições de Fases: formulada em 1937^[19], expressa que as transições de fase da matéria estão diretamente relacionadas com quebras de simetrias espontâneas (parâmetros de ordem local). Essa quebra de simetria evidencia uma transição de fase da matéria, que até o fim da década de 70 foi efetiva para descrever todas as transições de fase somente pela quebra de simetria espontânea entre os estados^[1]. Cada transição de fase estaria associada a um parâmetro de ordem local que é finito em sua fase ordenada e zero fora dela, implicando que a transição ocorre quando essa simetria é quebrada. Por exemplo, o derretimento da água possui uma quebra de simetria de translação discreta para contínua, a temperatura de Curie da transição de um ferromagneto para paramagneto apresenta uma quebra de simetria de rotação; ou mesmo a quebra da simetria $U(1)$ associada à transição de um material para a fase supercondutora^[20, 21, 22]. No exemplo da água, exemplificado na Figura 4, o parâmetro de ordem local ψ evidencia a transição de fase devido a quebra da simetria de translação contínua assim que a temperatura cai abaixo da temperatura crítica T_c ^[23] :

$$|\psi| = \begin{cases} |\psi_0| > 0 & (T > T_c) \\ 0 & (T < T_c) \end{cases}, \quad (13)$$

mostrando que a quebra de simetria associada à emergência desse parâmetro, afeta as propriedades macroscópicas do sistema através de uma transição de fase da matéria.

Temos então uma associação direta entre quebras de simetria e transições de fase da



Figura 4: Representação da quebra da simetria de translação contínua na transição de fase da água líquida para o seu estado sólido (representado no floco de neve), com simetria de translação discreta. Acima da temperatura crítica, o parâmetro de ordem local varia continuamente com a temperatura, com exceção do ponto crítico na temperatura de transição T_c , onde a simetria é quebrada e ocorre a transição de fase.

matéria. Porém a infalibilidade da teoria Ginzburg-Landau encontrou exceções após a descoberta das transições de fase de ordem topológica, que durante o fim da década de 1970 foi teorizada por Kosterlitz e Thouless através de uma transição de fase em duas dimensões em temperatura finita sem que haja quebra de simetria de parâmetro de ordem local^[24, 25]. Entretanto a primeira constatação experimental de ordem topológica se deu efetivamente com o efeito Hall Quântico por von Klitzing et al^[13].

Descoberta das Fases Topológicas da Matéria

O Prêmio Nobel de física de 2016^[26] foi concedido ao trio de cientistas britânicos David Thouless da Universidade de Washington, Duncan Haldane da Universidade de Princeton e Michael Kosterlitz da Universidade Brown, pelo trabalho teórico sobre as transições de fase topológicas e fases topológicas da matéria. Suas descobertas permitiram avanços na compreensão teórica das propriedades da matéria e criaram novas perspectivas para o desenvolvimento de materiais inovadores. Suas séries de trabalhos com ideias vindas da topologia combinadas com mecânica quântica permitiram explicar diversos fenômenos em sistemas bidimensionais, cuja área de aplicação se estende à computação e informação quântica, supercondutividade, magnetismo de filmes finos, superfluidez em superfícies e em isolantes topológicos. As aplicações tecnológicas dessas pesquisas são extremamente promissoras, podendo ser usadas desde em novas gerações de eletrônicos e produtos tecnológicos, até em áreas de aplicação cujo alcance ainda se encontra em perspectiva^[24, 25].

A busca por uma associação entre a topologia e a quântica culminou na elaboração dos números quânticos topológicos, graças a Thouless, Haldane e Kosterlitz. Tal busca permitiu compreender com clareza o que ocorre no efeito HQ inteiro, em que as variações

da condutividade Hall em função do campo magnético aplicado apresentam platôs que não dependem da forma nem da composição da amostra, um estado robusto em que cada platô está definido por um número quântico inteiro n em unidades de e^2/h [27].

Os estudos feitos por Frederick Duncan Haldane sobre cadeias de spin foram desenvolvidos usando argumentações topológicas. No caso de uma cadeia de spin, no qual os spins apresentam sentido contrário em relação aos spins vizinhos, um estado de fase conhecido como antiferromagnético, Haldane teorizou que era possível a formação de excitações coletivas conhecidas como spinons nesse sistema, cuja condição de existência tem uma dependência direta ao invariante topológico do sistema. As excitações de spinons surgem quando há uma pequena variação na temperatura, provocando um variação no número de precessões dos spins, contudo, Haldane concluiu que um sistema antiferromagnético pode apresentar spinons em temperatura zero no estado fundamental, para cadeias de spin semi-inteiro [25].

Devido à essas novas ferramentas conceituais desenvolvidas pelos ganhadores do Nobel de 2016 que foi possível prever novas formas de matéria até então desconhecidas, assim como compreender o comportamento de materiais exóticos e promissores. Materiais esses que são robustos topologicamente em relação à impurezas, defeitos e imperfeições de fabricação e que têm potencial de ser a base para a criação de tecnologias que poderão mudar a forma atual de organização de nossa sociedade. Inclusive, sabemos hoje a grande extensão do potencial de aplicabilidade do estudo da matéria topológica, que se estende desde supercondutores e computação quântica, até o desenvolvimento dos isolantes topológicos [25].

O estudo das transições de fase da matéria ganhou novas fronteiras com a inclusão da topologia, principalmente no estudo da transição de fase da matéria bidimensional. Na época da elaboração dos trabalhos teóricos de Berezinskii, Kosterlitz e Thouless, a matéria bidimensional era apenas uma descrição matemática, até que em 2004 os ganhadores do Nobel em física de 2010 [28], Andre Geim e Konstantin Novoselov verificaram efeitos de campo elétrico em um filme fino de grafeno bidimensional [29]. Materiais bidimensionais como o grafeno foram teorizados a apresentar transições de fase topológica. Neste caso, verificou-se que o estado fundamental de uma folha de grafeno exibe o efeito HQS de ordem topológica não trivial, robusto somente à pequenas perturbações do sistema devido ao baixo acoplamento spin-órbita [3].

Os trabalhos em colaboração de Kosterlitz e Thouless provaram a existência transição de fase em filmes finos causadas diretamente por defeitos topológicos que na superfície do filme fino se comportam como pares de vórtices e antivórtices. Em altas temperaturas os efeitos quânticos são menos perceptíveis e o sistema conjunto de defeitos topológicos se comporta de modo desordenado, entretanto quando o sistema se encontra em baixas temperaturas, os pares vórtices e antivórtices começam a aparecer, definindo no sistema uma transição de

fase que é caracterizada somente pela ordem topológica, conhecida como transição de fase BKT^[30], sendo hoje considerada a forma correta de explicação para diversos fenômenos e estados exóticos da matéria, tal como a supercondutividade e superfluidez em superfícies e filmes finos^[24].

Transições de Fase Topológica (Transição BKT)

As transições de fase em sistemas de baixa dimensionalidade, mais precisamente os modelos bidimensionais, são relevantes para pesquisa devido aos comportamentos e efeitos não observados em sistemas tridimensionais^[24]. Na matéria condensada podemos encontrar diversas fases, que em geral associamos às fases da matéria sólida, líquida ou gasosa. Porém, também é possível classificar os materiais quanto as suas propriedades elétricas ou magnéticas, por exemplo. As transições de fase mais comuns estão relacionadas com mudanças de temperatura como no caso de um material magnético que ao ser aquecido acima da temperatura crítica torna-se não magnético. Por outro lado, existem transições de fase mais complexas relacionadas com a topologia do sistema, como é o caso da transição de fase topológica BKT^[30], cujo nome é homenagem ao trio de físicos Berezinskii, Kosterlitz e Thouless, sendo de grande relevância nos sistemas de baixa dimensionalidade.

A transição BKT ocorre em sistemas bidimensionais com simetria $U(1)$, correspondente à simetria das rotações circulares no plano, $U(1) \rightarrow e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$, presente em sistemas tais como modelos magnéticos, supercondutores e superfluidos em filmes finos. Nesse caso, abaixo da temperatura de transição T_{BKT} o modelo apresenta uma correlação com decaimento algébrico (uma ordem de quasi-longo alcance) enquanto para altas temperaturas o decaimento é exponencial. A transição entre os dois regimes foi explicada por Kosterlitz e Thouless, e independentemente por Berezinskii, por meio do desacoplamento entre pares vortice e anti-vortice, Figura 5. Em baixas temperaturas os pares tendem a permanecer ligados o que mantém o sistema quase ordenado. Por outro lado, quando $T > T_{BKT}$ os vórtices tornam-se livres e o modelo passa a ser altamente desordenado^[25].

A temperatura de transição pode ser estimada com um raciocínio simples. Uma vez que a energia de par vortice anti-vortice é dada por^[31] :

$$E = \pi J \ln \left(\frac{L}{a} \right), \quad (14)$$

sendo $J > 0$ a constante de acoplamento entre vizinhos próximos, L o tamanho do par, a o espaçamento de rede, e a entropia é calculada considerando todas as possíveis posições nas quais o par pode ser encontrado, ou seja $S = k_B \ln \Omega$, sendo $\Omega = (L/a)^2$ o número de microestados. Temos portanto que a energia livre de Helmholtz, $F = E - TS$, é dada por:

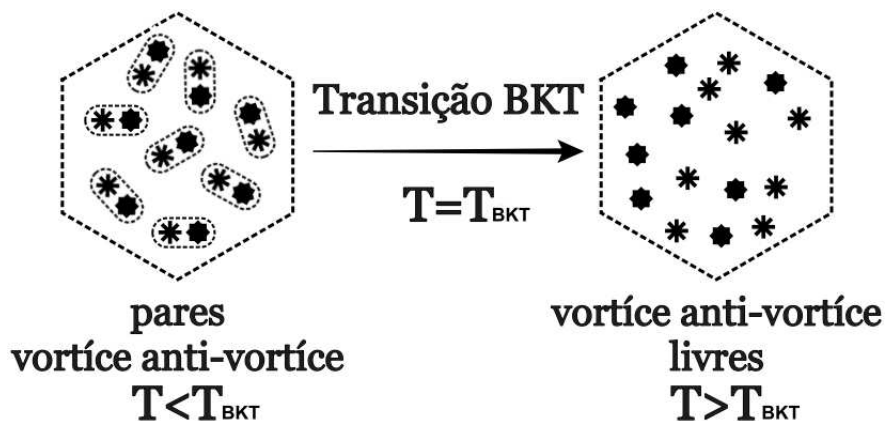


Figura 5: Esquema da transição BKT entre pares vórtice anti-vórtice.

$$F = (\pi J - 2T k_B) \ln \left(\frac{L}{a} \right), \quad (15)$$

em que $F = 0$ quando a energia interna não pode realizar trabalho, implicando na transição da correlação com decaimento algébrico para decaimento exponencial, no qual essa transição de fase irá corresponder à $T = T_{BKT}$ em (15). Portanto:

$$T_{BKT} = \frac{\pi J}{2k_B}. \quad (16)$$

Em baixas temperaturas, $T < T_{BKT}$, a energia de Helmholtz é minimizada quando a entropia é pequena e os pares de vórtice anti-vórtices são mantidos próximos. Já para $T > T_{BKT}$ é mais conveniente aumentar a entropia (mesmo com o aumento da energia interna) separando o par de soluções topológicas^[25].

Em relação às soluções topológicas do tipo vórtice, do ponto de vista tecnológico, podemos por exemplo relacionar as duas direções de rotação dos vórtices com os bits 0 e 1. Dessa forma construir dispositivos de armazenamento digital ou no desenvolvimento de portas lógicas magnéticas em substituição aos atuais transistores presentes em qualquer microprocessador, sendo o controle sobre o posicionamento das soluções topológicas muito importante. Além da aplicação em dispositivos de armazenamento, as soluções topológicas do tipo vórtice também estão presentes na área médica; um grupo de pesquisa da *Materials Science Division*, em um trabalho *in vitro* por meio da injeção de nanopartículas magnéticas e aplicação de pequenos campos magnéticos, conseguiu eliminar 90% de células doentes de um tumor cerebral sem prejudicar o tecido saudável. Tal técnica só foi possível devido à formação sobre as nanopartículas de estruturas tipo vórtice que reagem de forma apropriada ao campo externo aplicado^[32].

Todas essas aplicações são devido aos materiais de ordem topológica, sendo que materiais que apresentam o efeito Hall Quântico e Hall Quântico de Spin estão incluídos nessa categoria. Os pares vórtice anti-vórtice são modos coletivos de spins ordenados na topologia do sistema que poderão render aplicações em armazenamentos digitais, enquanto materiais com efeito Hall Quântico de Spin estão em uma posição mais vantajosa pois suas aplicações em transistores está atrelada à spintrônica, podendo no futuro associar os bits 0 e 1 com a direção de rotação de spins individuais. Sendo portanto, do ponto de vista tecnológico de processamento digital, uma maior vantagem o estudos de materiais com efeito Hall Quântico de Spin em relação aos materiais que apresentam soluções do tipo vórtice.

Sistemas Magnéticos e Defeitos Topológicos

Os defeitos topológicos estão associados a excitações coletivas de spins, dando origem a quase-partículas tais como vórtices e skyrmions. A robustez e proteção topológica dessas quase-partículas está associada ao chamado teorema da esfera cabeluda^[33]. De modo simplório, esse teorema pode ser entendido quando consideramos que se é impossível ter um campo vetorial contínuo tangente a superficial de uma esfera, sem que se tenha pelo menos um ponto nulo. Considere o exemplo de se tentar pentear uniformemente uma esfera cabeluda, é impossível devido à topologia da esfera e terá sempre pontos de singularidades onde se formam redemoinhos (vórtices), algo semelhante ao redemoinho de cabelo que algumas pessoas possuem no topo da cabeça, sendo esses redemoinhos protegidos topologicamente.

O Modelo de Heisenberg: Um sistema macroscópico real contem milhões de partículas, podendo se estudar algumas de suas propriedades pela física estatística, termodinâmica e também pelas leis da mecânica quântica. Devido à complexidades nas interações contidas em sistemas magnéticos, é necessário a utilização de simplificações para sua modelagem, tais como considerar apenas a interação de troca entre primeiros vizinhos (spins próximos). A interação de troca se dá devido a sobreposição das funções de onda dos elétrons, relacionada à suas posições e orientação relativa dos seus spins, podendo ser modelada como uma interação do tipo $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, em que \vec{S}_i é o spin do íon localizado no sítio i . A Hamiltoniana de Heisenberg isotrópica para sistemas magnéticos é dada por^[24] :

$$H = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (17)$$

com $J > 0$ a constante de acoplamento entre vizinhos próximos, onde iremos impor o vínculo não-linear $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 1$. A equação (17) descreve a interação de spins em uma rede regular, considerando apenas a interação de troca entre primeiros vizinhos.

O sinal negativo na Hamiltoniana representa um acoplamento ferromagnético, Figura 6,

uma vez que a energia mínima do estado fundamental é atingida quando os spins se alinham paralelamente $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = 1$. Já o sinal positivo na Hamiltoniana representa um acoplamento antiferromagnético, Figura 7. Neste caso a energia mínima do estado fundamental (clássico) é atingida quando os spins se alinham antiparalelamente $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$.

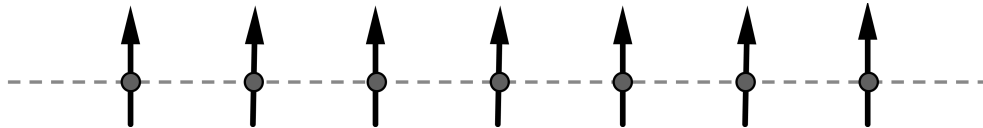


Figura 6: Sistema ferromagneto

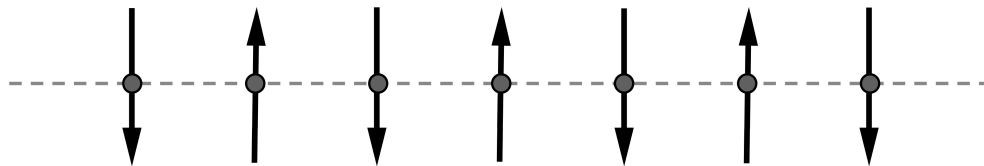


Figura 7: Sistema antiferromagneto

Podemos levar em consideração também a presença de anisotropias no sistema, isto é, a existência de uma direção preferencial para os spins apontarem. Neste caso, a Hamiltoniana fica da seguinte forma:

$$H = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z \cdot S_j^z \right). \quad (18)$$

O termo λ descreve a constante de anisotropia, sendo alguns dos seguintes modelos definidos^[24]:

- i) Se $\lambda = 0$ temos a Hamiltoniana da equação (17), isto é, o modelo de Heisenberg isotrópico caracterizado por não haver nenhuma direção preferencial para os spins apontarem;
- ii) Se $\lambda = 1$ a equação pode ser reescrita da seguinte forma:

$$H = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^x \cdot S_j^x + S_i^y \cdot S_j^y \right). \quad (19)$$

É possível se obter dois modelos distintos nesse caso. Primeiro é o modelo XY que é definido pela restrição $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 1$, ou seja, há as três componentes de spin. Segundo é o modelo conhecido como Rotor Planar no qual é caracterizado

pela restrição $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 = 1$, ou seja, não há a terceira componente de spin e portanto os spins estão confinados no plano;

- iii) Se $0 < \lambda < 1$ o modelo descreve um sistema em que os spins possuem a preferência de se alinharem paralelamente ao plano, esse modelo é conhecido como de Heisenberg de plano-fácil. Sendo descrito pela mesma Hamiltoniana da equação (18) considerando um alinhamento no plano- xy ;
- iv) Se $\lambda < 0$ o modelo descreve um sistema em que os spins se alinham perpendicularmente ao plano, devido a anisotropia para o sistema descrito pela Hamiltoniana da equação (18) o alinhamento se dá no sentido do eixo- z . Esse modelo é conhecido como de Heisenberg de eixo-fácil.

É possível também acrescentar outros termos à Hamiltoniana de modo a incluir outras anisotropias, correções perturbativas, campos magnéticos ou novas interações. No caso da Hamiltoniana de Heisenberg isotrópica na equação (17) a inclusão de um campo magnético externo na interação permite o surgimento de magnons a temperatura zero, que correspondem às excitações de ondas de spin. Já no caso da Hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica, equação (18), ao serem feitas aproximações de campo médio, obtém-se soluções topológicas como vórtices com diferentes anisotropias no modelo eixo-fácil, plano-fácil, XY e Rotor Planar; assim como soluções tipo skyrmion no modelo- σ não linear $O(3)$ que são soluções de campo estável na aproximação de campo médio para o modelo isotrópico^[34]. Os estudos sobre sistemas físicos em baixas dimensões são de grande interesse para a comunidade científica, sendo que alguns sistemas com soluções topológicas são altamente estáveis, permitindo aplicações tecnológicas^[24].

Impurezas contidas em um sistema magnético são capazes de o perturbar, provocando deformações na configuração topológica, assim como mudanças nas propriedades físicas. Além disso, as configurações topológicas quando colocadas em movimento, por exemplo através de campos magnéticos, podem ser espalhadas pelos centros não-magnéticos. Para o caso de um único defeito, é verificado que no modelo XY que a interação entre os vórtices magnéticos e as impurezas da rede é atrativa para curtas distâncias se o vórtice mantém seu formato sem deformações. Já para grandes separações entre o centro do vórtice e a vacância, o potencial é repulsivo devido as deformações provocadas na estrutura. Geralmente as interações entre as soluções topológicas e os defeitos na rede são atrativas para pequenas separações^[24].

Os materiais que apresentam soluções topológicas do tipo vórtice necessitam de uma interação precisa com as impurezas contidas no material, podendo sofrer deformações em dadas situações. Entretanto, os materiais de ordem topológica que possuem o efeito Hall

Quântico de Spin são robustos e protegidos contra defeitos e impureza não-magnéticas naturalmente, característica protegida pela simetria de reversão temporal.

2.4 Invariantes Topológicos

Na matemática, o homeomorfismo é a noção de isomorfismo de espaços topológicos. Isso significa que se uma função de um espaço métrico for contínua e bijetiva e a sua inversa for garantidamente contínua então essa função possui homeomorfismo. Uma função de translação e homotetia (redução ou ampliação de distâncias e áreas a partir de um ponto fixo) possuem homeomorfismo de tal modo que a aplicação dessas funções em duas bolas abertas qualquer $B(x, c)$ e $B(y, d)$ (correspondente ao conjunto de pontos cuja distância ao raio c e d é inferior o centro x e y da bola), implica que elas permanecem topologicamente situadas da mesma maneira nesse espaço vetorial, assim como entre duas bolas fechadas no qual os pontos de fronteira estão incluídos. Topologicamente, isso equivale a dizer que transformações suaves tal como translação e homotetia não alteram a topologia do sistema e funções equivalentes sob essas transformações possuem homeomorfismo entre si.

Podemos compreender a topologia do ponto de vista matemático como o estudo de um determinado espaço que permite preservar as suas propriedades fundamentais mesmo sob pequenas deformações, consideradas deformações contínuas, algo como amassar ou dobrar uma massa de pão ou mesmo esticá-la sem contudo rasgá-la ou colar partes. Assim, topologicamente falando, seria impossível produzir um buraco na minha massa de pão por meio de deformações suaves, o que implicaria que a falta de buracos na minha massa de pão configuraria uma propriedade topológica fundamental da massa, por exemplo^[25].

Uma forma simples de se entender como a topologia se associa com a física, consiste em tentar ver basicamente quais associações podemos fazer da topologia matemática com o mundo que nos cerca. Poderíamos classificar topologicamente os materiais pelo número de furos que possuem, de tal forma que uma xícara de chá pertence à mesma classe topológica que uma rosquinha (toro geométrico). Devido a possuir o mesmo número de buracos, seria possível topologicamente, caso a xícara fosse modelável, produzir uma deformação contínua na xícara preservando o buraco de modo que sua forma final fosse a da rosquinha, conforme Figura 8, assim como uma pirâmide pode ser suavemente deformada em uma esfera, na ausência de buracos. Porém não é possível deformar uma rosquinha em uma pirâmide por meio de deformações suaves, pois seria necessário remover o furo/buraco, o que significa que pertencem a classes topológicas diferentes. Com isso, concluimos que o número de buracos independe da forma ou mesmo tamanho do objeto ou sistema pois se mantém preservado sob deformações contínuas, sendo essa propriedade considerada topologicamente invariante^[25, 35].

Na física, mais especificamente no estudo dos sólidos cristalinos, uma forma de se aplicar a

topologia consiste na identificação de classes topológicas associadas às estruturas eletrônicas de bandas dos materiais. A presença de desordens, como impurezas ou mesmo mudanças no formato geométrico da amostra, não altera a classificação topológica de um dado material, desde que as modificações na estrutura de bandas ocorram de forma adiabática. Nesse contexto, entendemos por modificações adiabáticas quaisquer transformações suaves que não alterem de forma abrupta a estrutura de bandas (e auto-estados associados), e nem fechem o gap de energia entre a banda de condução e a banda de valência. Desta forma, o gap de energia existente entre o estado excitado e o fundamental na Hamiltoniana de alguns sistemas se associa com a presença de um invariante topológico, que permanece inalterado sob transformações adiabáticas que não fechem esse gap de energia existente. Desta forma, as amostras original e modificada pertencem à uma mesma classe topológica^[25].



Figura 8: Homeomorfismo entre uma xícara e uma rosquinha.

Mesmo entre o *bulk* isolante em um material com efeito Hall Quântico e um isolante comum existe significativa diferença, que consiste em um parâmetro topológico invariante. O invariante topológico permite catalogar em mesmas classes topológicas formas que podem se transformar em outras através de deformações contínuas^[35].

Basicamente esses buracos pertencem à topologia de cada conjunto de sistemas, de certo modo o número de furos pode ser entendido como o invariante topológico em que sua variação ocorre somente em números inteiros, até porque não é possível existir meio furo, assim o número de buracos está associado ao invariante topológico que é o *genus* g classificado na topologia. Essa relação entre geometria e topologia está expressa pela equação de Gauss e Charles Bonnet:

$$\frac{1}{2\pi} \int_S K dA = 2(1 - g), \quad (20)$$

em que a superfície S seja sem fronteiras ou descontinuidades e K seja a curvatura local

da superfície. É interessante notar que o lado esquerdo da equação (20) é geométrico e contínuo, entretanto o lado direito se encontra relacionado ao *genus* topológico e portanto seu valor é quantizado. As várias superfícies S cuja solução da equação de Gauss e Charles Bonnet implique no mesmo *genus* g , são portanto de mesma classe topológica. A forma da rosquinha de nossa exemplificação é conhecida na matemática como toro geométrico, o *genus* topológico associado a essa forma geométrica é $g = 1$, devido a ser uma superfície sem fronteiras ou descontinuidades com um “furo” associado, o mesmo *genus* topológico é obtido pela forma geométrica associada a nossa xícara, implicando na invariância topológica entre as duas formas geométricas^[27].

A classificação topológica se associa a estrutura de bandas de modo semelhante. Por exemplo, no caso de um isolante, uma variação (deformação suave) que não feche o gap de energia na Hamiltoniana que configura a estrutura de bandas, irá corresponder a um conjunto de estrutura de bandas (e seus autoestados) que levam a uma mesma fase topológica, cujo fechamento desse gap corresponde à uma deformação “não-suave” e em alguns sistemas se associa à uma transição de fase topológica análoga a adicionar um buraco em uma esfera. Assim, a mudança de invariante topológico se associa à uma transição de fase, correspondentemente à Figura 9 entre o efeito Hall e HQ.

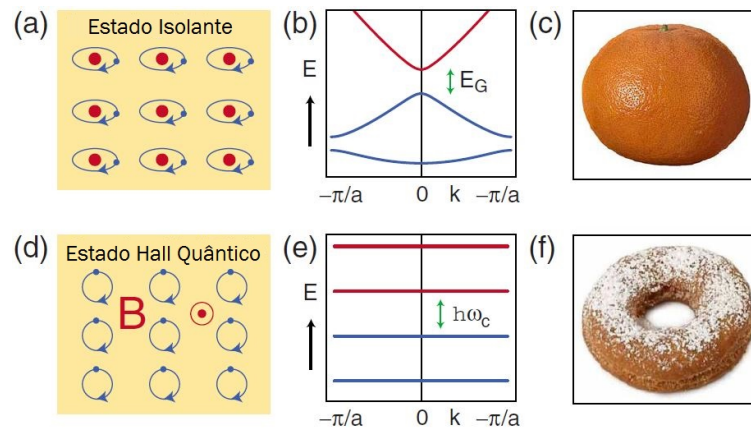


Figura 9: (a)-(c) Estado Isolante, (d)-(f) Estado HQ. (b) Exemplo de uma estrutura de bandas de um isolante, (e) nível de Landau visto como estrutura de bandas. (c) Laranja (esfera) de *genus* $g = 0$, (f) rosquinha (toro geométrico) de *genus* $g = 1$. ^[35]

Invariante TKNN e Fase de Berry

O invariante topológico TKNN (D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale e M. den Nijs)^[36], nos permite definir e distinguir diferentes fases topológicas em um sistema através de sua função de onda, podendo também distinguir entre fases triviais e não triviais.

A fase de Berry é uma fase geométrica obtida pela função de onda ao evoluir ao longo de um caminho fechado C no seu espaço de parâmetros. Tal fase implica nas propriedades topológicas em função das propriedades geométricas da banda de energia ao longo do espaço de parâmetros da Hamiltoniana, que no caso dos sólidos cristalinos se resume à zona de Brillouin^[37]. De forma que para obter a diferença de fase do processo adiabático em um caminho fechado, associamos a fase de Berry com as funções de onda de Bloch $|u_m(k)\rangle$, de cada banda ocupada m , definindo a conexão de Berry como:

$$\vec{\mathcal{A}}_m = i\langle u_m(k) | \vec{\nabla}_k | u_m(k) \rangle, \quad (21)$$

e portanto, a fase de Berry γ_C por:

$$\gamma_C = \oint_C \vec{\mathcal{A}}_m \cdot d\vec{k}. \quad (22)$$

Tendo sido obtida a conexão de Berry $\vec{\mathcal{A}}_m$, podemos então integrar o rotacional dela ao longo da superfície da zona de Brillouin, considerando não haver degenerescências do vetor \vec{k} ao longo do *loop* fechado, assim podemos definir o número de Chern a partir da soma de todas as bandas ocupadas:

$$n = \sum_{m=1}^N n_m = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2\pi} \int d^2\vec{k} \vec{\mathcal{F}}_m = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2\pi} \int d^2\vec{k} (\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}_m); \quad (23)$$

em que $\vec{\mathcal{F}}_m = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}_m$ é o fluxo de Berry do vetor \vec{k} na superfície da zona de Brillouin. Para melhor entender a solução, podemos perceber que existe uma semelhança na definição do número de Chern com a equação (20) de Gauss e Charles Bonnet, em que analogamente temos a curvatura local da superfície como o fluxo de Berry e a superfície como a zona de Brillouin. Temos então uma semelhança com o *genus* g e número de Chern n como invariantes topológicos^[35].

Dado pela equação (23), o invariante TKNN permite não só separar fases topologicamente triviais das não triviais como também a distinção de diferentes fases topológicas, sendo $n \in \mathbb{Z}$ sempre dado por um número inteiro.

Classes Homotópicas

Além do invariante TKNN, existem também outros invariantes topológicos e maneiras diferentes de se deduzir os mesmos invariantes, a depender da situação e do modelo trabalhado. Entre esses invariantes, um que é frequentemente usado para caracterização de defeitos topológicos é o *winding number* w ou índice de giro, definido na matemática

como um número contido nos inteiros que corresponde ao número total de voltas que um vetor ou uma curva parametrizada, fechada e plana realiza em torno de um ponto X .

Por exemplo, no caso do defeito topológico tipo vórtice, o *winding number* w é não nulo e mede o total de rotações que os spins realizam ao longo de uma curva fechada, ou basicamente o número de vezes que os spins rotacionam em torno da origem, exemplificado na Figura 10.

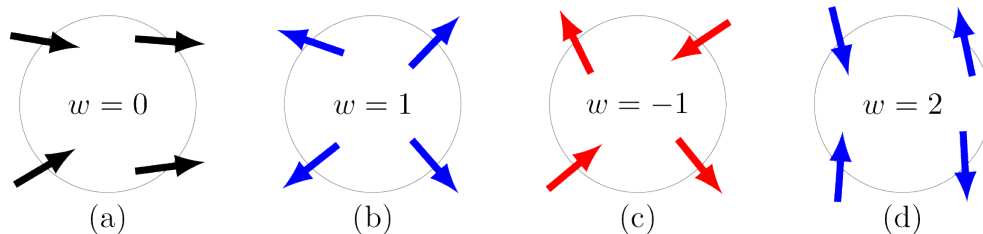


Figura 10: *Winding number* para rotações em relação a origem. (a): Ferromagneto, spins alinhados paralelamente; (b): Vórtice, spins realizam uma rotação no sentido horário ao longo da origem; (c): Anti-vórtice, spins realizam uma rotação no sentido anti-horário ao longo da origem; (d): Vórtice de ordem superior, spins realizam duas rotações ao longo da origem^[38].

Formalmente, o *winding number*, pode ser definido como^[39] :

$$w = \frac{1}{2\pi} \oint \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{r}, \quad (24)$$

em que $\theta = \Im \ln \psi_0(\vec{r})$ ou também pode ser definido como $\theta = \arctan[M_y/M_x]$, para a componente imaginária \Im de um dado parâmetro escalar complexo $\psi_0(\vec{r})$ ou um campo vetorial planar (M_x, M_y) . Pela equação (24), o *winding number* permite a distinção de diferentes fases topológicas, sendo $w \in \mathbb{Z}$ sempre dado por um número inteiro, no qual representa ao longo do caminho fechado os números de giros realizados em torno de um ponto X , e que topologicamente o caminho pode ser suave e continuamente deformado sem contudo alterar o invariante w .

Compreendendo o conceito da topologia no estudo de propriedades que são independentes das deformações ou coordenadas de um dado sistema, temos o que é chamado de homotopia que permite a classificação dos espaços topológicos. Os grupos de homotopia $\pi_n(X)$ permitem distinguir as classes homotópicas de um dado espaço X no conjunto n , correspondendo ao mapeamento de uma esfera n -dimensional S^n . O caso do *winding number* para o vórtice, corresponde ao grupo de homotopia $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, caracterizado pelo caminho fechado (que mapeia S^1) na superfície de um plano S^1 , possuindo as classes homotópicas contidas nos inteiros $(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$. Outros espaços para o mesmo grupo de homotopia por exemplo, tal

como a esfera e o toro na Figura 11, nos mostra que na classificação de espaços topológicos com diferentes grupos de homotopia não podem ser topologicamente associados e portanto não possuem homeomorfismo, mas ainda é possível ter espaços topológicos não homeomórficos pertencentes ao mesmo grupo de homotopia. O grupo de homotopia $\pi_1(S^2)$ da esfera é trivial devido ao fato de menor dimensionalidade relacionado à conjectura de Poincaré, no qual o caminho fechado ao longo da esfera pode sempre ser por homeomorfismo reduzido a um ponto, tornando impossível a classificação de índice de giros; já no caso do grupo de homotopia $\pi_1(T)$ do toro, temos duas possibilidades de percorrer um caminho fechado irreduzível homeomorficamente a um ponto, correspondendo as coordenadas toroidal e poloidal do toro geométrico, levando ao grupo \mathbb{Z}^2 .

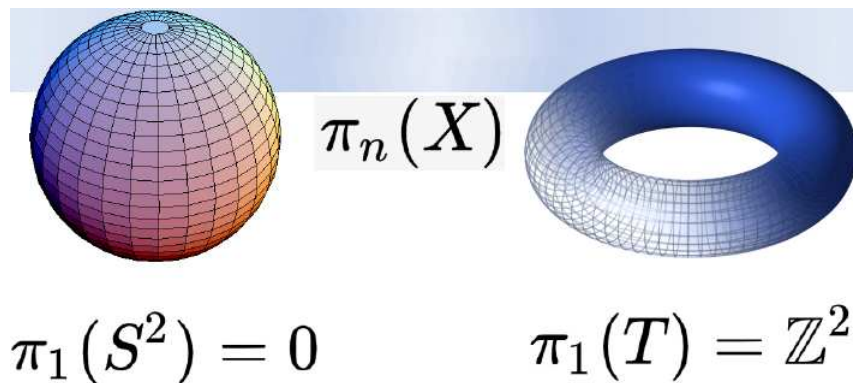


Figura 11: Diferentes espaços topológicos (esfera e toro) de mesmo grupo de homotopia, mas de classes homotópicas diferentes.

Os defeitos topológicos do tipo vórtice e anti-vórtice pertencem às classes homotópicas $+1$ e -1 respectivamente, que mapeiam as respectivas classes que são invariantes às deformações contínuas ao longo do caminho fechado, cujo conjunto de todas as classes formam o grupo de homotopia. Assim, estão diretamente relacionadas aos grupos de homotopia, permitindo classificar em um dado espaço topológico de dimensão espacial D todos os defeitos topológicos que possam ter um significado físico, restritos à satisfazer a condição $D > n + 1$ para que possa fisicamente existir um defeito topológico de $(D - n - 1)$ -dimensão. Por exemplo, $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, dado por um caminho fechado $n = 1$ na superfície de um plano $D = 2$, possui um defeito topológico de 0 -dimensão caracterizado por um ponto, cujo significado físico corresponde a soluções tipo vórtice. Tal interessante mapeamento auxiliou os físicos na criação de uma tabela periódica de classificação de defeitos topológicos em isolantes e supercondutores^[40].

2.5 Efeito Hall Quântico

Quando se leva um sistema com efeito Hall à um estado crítico de baixa temperatura e forte campo magnético, um novo fenômeno se manifesta, descoberta que culminou no efeito HQ em 1980 por von Klitzing et al^[13]. Tal trabalho feito no início da década de 80 tinha como objetivo principal demonstrar um novo método experimental de alta precisão para determinar a constante de estrutura fina $\alpha = e^2/2\epsilon_0hc$, em que e é a carga do elétron, ϵ_0 a permissividade elétrica do vácuo, h a constante de Planck e c a velocidade da luz no vácuo. Contudo, esse trabalho acabou sendo um grande passo experimental no estudo de transição de fase topológica, já que o efeito Hall Quântico apresenta transição de fase da matéria sem quebra de simetria espontânea, contrariando os paradigmas de Landau^[1].

O dispositivo usado por von Klitzing, Dorda e Pepper para verificar experimentalmente o efeito HQ foi o transistor de efeito de campo de semiconductor de óxido metálico, conhecido de forma abreviada como semiconductor do tipo MOSFET (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*). Como um transistor de efeito de campo, o MOSFET funciona através do efeito de um campo elétrico na junção, sendo composto de um canal de materiais semicondutores de tipo N ou de tipo P no qual o terminal de comporta é um condutor ou semiconductor colocado sobre o canal, mas separado por uma camada isolante, conforme a Figura 12. A aplicação de uma tensão entre a comporta e o terminal fonte gera um campo elétrico que passando pelo isolante gera uma inversão no canal original abaixo dele, criando um condutor através do qual a corrente pode passar. Esse dispositivo na prática é usado para controlar o fluxo de corrente entre o terminal de saída e o terminal fonte, podendo por exemplo amplificar um sinal enviado em um equipamento de alto-falante.

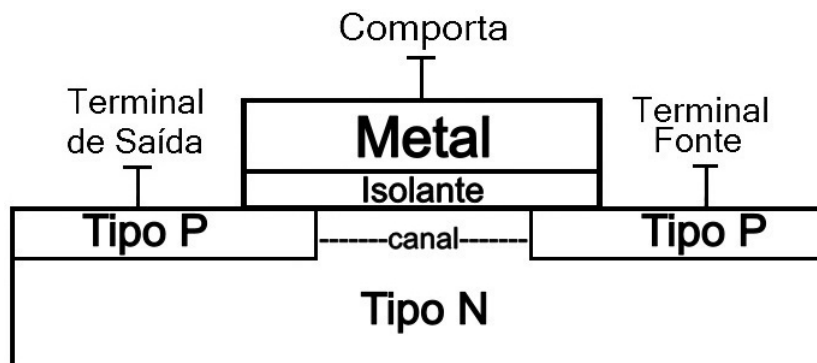


Figura 12: Representação de um semiconductor do tipo MOSFET.

O Efeito Hall Quântico se manifesta em baixas temperaturas de forma que os efeitos quânticos sejam maiores que os efeitos térmicos, submetido a um forte campo magnético

perpendicular ao sistema de forma que os estados eletrônicos sejam separados dando origem aos níveis de Landau. Por isso, no semiconductor de silício do tipo MOSFET usado por von Klitzing, foi aplicado um campo magnético extremamente alto ($\approx 18T$) com o sistema à temperaturas próximas do zero absoluto ($\approx 1,5K$). Sob tais condições, a Hamiltoniana que descreve tal modelo é dada por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} \sum_i \left[\left(\vec{p}_i - e\vec{A}(r_i) \right)^2 + V_{imp}(\vec{r}_i) \right], \quad (25)$$

onde consideramos no somatório de índice i um gás de elétrons livres bidimensional em temperatura nula, sem spin e não interagentes, e $V_{imp}(\vec{r}_i)$ como o potencial aleatório causado pelas impurezas do material. Observe que o termo quadrático da Hamiltoniana (25) é igual ao da equação (6) para os níveis de Landau, com a diferença do potencial induzido pelas impurezas contidas no material. Dessa forma, os efeitos quânticos do sistema levam igualmente a soluções de energia do tipo oscilador harmônico, cuja solução é dada pela quantização das órbitas circulares dos elétrons com energia^[35]:

$$\epsilon_m = \hbar\omega_c \left(m + \frac{1}{2} \right), \quad (26)$$

sendo $\hbar = h/2\pi$ e a frequência ciclotrônica dada por $\omega_c = \frac{eB}{m_e c}$. Entretanto, existe uma diferença em relação aos níveis de energia de Landau para temperatura nula e elétrons livres em relação ao efeito Hall quântico, sendo o segundo com espalhamento dos níveis de Landau. Os elétrons são confinados em uma estrutura cristalina e temperatura não nula, no qual o potencial $V_{imp}(\vec{r}_i)$ de defeitos da rede é responsável pelo espalhamento na densidade de estados, tal como na Figura 3, produzindo alargamento nos níveis de Landau através de estados localizados e estendidos.

Podemos nos interrogar no modelo proposto pela Hamiltoniana (25) a desconsideração do spin do elétron levando em conta os graus de liberdade do spin como degenerado. Porém, sob a aplicação de um campo magnético, tal situação não é válida por conta do Efeito Zeeman que desdobra os níveis de energia devido a aplicação do campo magnético, separando os spins *up* e *down*. No caso para os níveis de Landau, teremos uma subdivisão dos níveis, Figura 13, que ocorre assim que o primeiro nível de Landau esteja preenchido em $N = 1$ com um desenvolvimento coerente e espontâneo de um estado ferromagneto gerado pelos spins em uma única direção, com um espaçamento de energia entre os estados *up* e *down* dado por $\Delta_Z = |g * \mu_B B_\perp|$, sendo g^* o fator g que depende do núcleo atômico, μ_B o magnéton de Bohn e B_\perp o campo magnético perpendicular $\hbar\omega_c$, na mesma ordem que os espaçamentos de energia dos níveis de Landau, entretanto no efeito Hall

Quântico, $\Delta_Z < V_{imp}(\vec{r}_i)$ devido aos defeitos e da estrutura de rede da amostra, por exemplo $\Delta_Z \simeq \hbar\omega_c/66$ para o semiconductor GaAs, de forma que o potencial devido as impurezas sendo maior se sobrepõe ao preenchimento de energia dos estados *up* e *down*^[15].

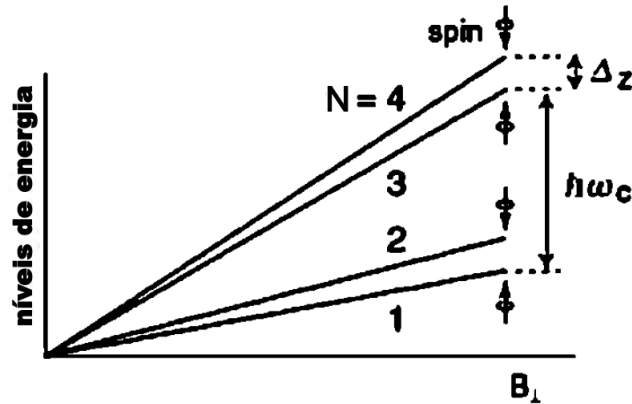


Figura 13: Quantização dos níveis de energia de Landau, no qual a energia entre dois níveis sucessivos é dado por $E = \hbar\omega_c$, em que o efeito Zeeman desfaz a degenerescência entre os graus de liberdade do spin *up* e *down* e cada nível contenha dois subníveis de energia com gap de $\Delta_Z = |g * \mu_B B_{\perp}|$ ^[15].

O comportamento da condução no efeito Hall Quântico pode ser analisado pelos níveis de Landau, no qual os estados localizados não conduzem corrente, enquanto os estados estendidos conduzem. A energia de Fermi varia com o campo magnético aplicado, quando se encontra no gap que separa os níveis de Landau ocupados dos níveis vazios, o interior do sistema atua como um isolante comum com os elétrons nos orbitais ciclotrônicos, porém quando a energia de Fermi coincide com um dos níveis de Landau o interior passa a se comportar como condutor de forma que novos elétrons possam preencher os níveis eletrônicos.

É também importante notar que os orbitais eletrônicos não são fechados nas bordas do material, implicando em um estado de borda metálico com condução sem gap de energia, Figura 14. Tal estado de borda metálico é topologicamente protegido, de forma que tal estado persiste mesmo com transformações adiabáticas na Hamiltoniana (que não fecha o gap de energia entre as bandas). A condução metálica de corrente é sem perda de energia por calor (efeito Joule) por conta da ausência de gap de energia nas bordas. Devido à proteção topológica, o transporte de portadores de carga nas bordas é sem dissipação e insensível à desordens não magnéticas, de tal forma que um elétron não sofre espalhamentos devido à impurezas na amostra^[2].

Temos então que no estado Hall Quântico, o interior (*bulk*) passa a ter o comportamento de um isolante na direção de corrente aplicada, enquanto os elétrons passam a se deslocar nas bordas do material fazendo surgir uma corrente com condutividade Hall σ_{xy} quantizada,

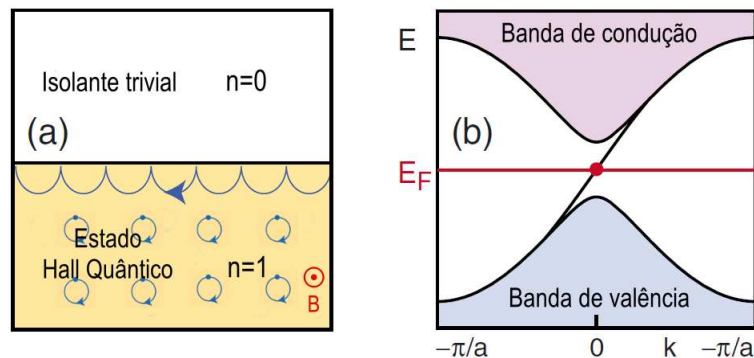


Figura 14: (a) interface isolante trivial e efeito Hall Quântico, com condução quiral dos elétrons nos estados de borda; (b) representação dos níveis de Landau vistos como bandas de energia com o estado de borda conectando as bandas de valência e condução^[35].

conforme o gráfico da Figura 15 (lembrando a relação entre a resistividade e condutividade $\rho = 1/\sigma$), diferente do esperado que era uma condutividade Hall diretamente proporcional a tensão do terminal de fonte aplicada no MOSFET, conforme o gráfico da Figura 2 para o efeito Hall Clássico. Essa quantização se dá basicamente devido a órbita circular dos elétrons com frequência ciclotrônica ω_c , no qual os elétrons só assumem estados orbitais com energia discreta. Sendo a condutividade Hall dada por^[35]:

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}, \quad (27)$$

em que e é a carga do elétron e N é o número inteiro que indica o número de níveis de Landau completamente ocupados, motivo que leva a esse efeito ser também chamado de Hall Quântico Inteiro. O número N associa a área de célula unitária envolvida pelo fluxo magnético quantizado, de forma que $N = \frac{eB}{\eta hc} = \frac{B}{\eta \phi_0}$, em que η é densidade de portadores de carga e ϕ_0 é o quanta de fluxo magnético. Note que os platôs de resistividade no efeito Hall Quântico aparecem quando a energia de Fermi permanece entre os níveis de Landau, de forma que não há alteração na resistividade até que todos os nível de energia dos orbitais eletrônicos associados ao maior nível de Landau N seja completamente preenchido.

O mais impressionante em relação a corrente hall σ_{xy} é a precisão da quantização inteira dos platôs dados pela razão da corrente com a voltagem, tendo sido da ordem de 1 por 10^5 em 1980^[13] e reproduzido com precisão de 1 por 10^9 em 2005^[41], também por von Klitzing. Tamanha precisão está diretamente atrelada a natureza topológica da corrente, já que podemos também representá-la explicitamente pelo número de Chern^[42, 43] :

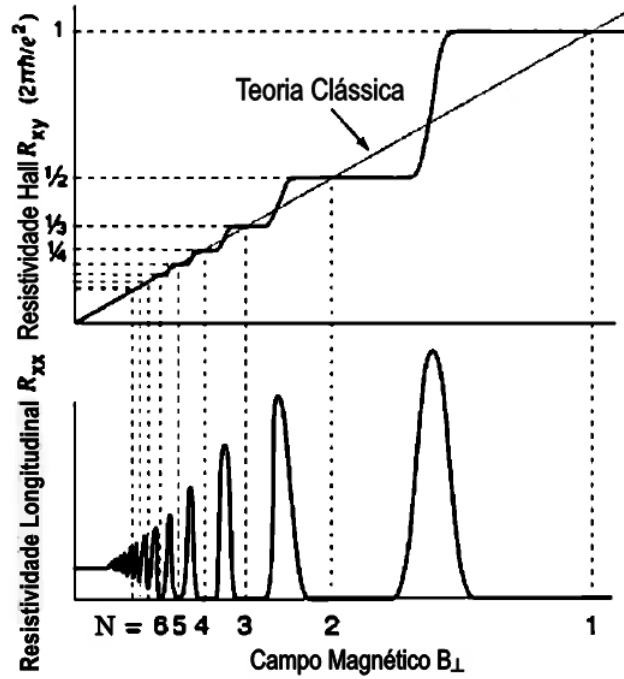


Figura 15: Resistividade Hall e Longitudinal dadas em função do campo magnético para o efeito HQ em um gás de elétrons a baixas temperaturas e forte intensidade de campo magnético, em que N caracteriza cada nível quantizado, apresentando os platôs quantizados na resistência Hall e na resistência longitudinal apresentando o efeito de Shubnikov-de Haas, que se anula nos platôs^[15].

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi h} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \left(\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \right\rangle \right) = N \frac{e^2}{h}, \quad (28)$$

sendo ψ a função de onda do sistema Hall e α, β parâmetros de fase ($e^{i\alpha L_1}, e^{i\beta L_2}$) associados as condições de contorno definidas pelo caminho da corrente L_1 e voltagem Hall L_2 provocadas, respetivamente.

Tal descoberta levou von Klitzing a ganhar em 1985^[44] o prêmio Nobel em física, sendo uma característica muito importante o fato de que a quantização dos valores da condutividade Hall são muito precisos em relação aos valores que foram medidos experimentalmente. Seus estudos ainda são tópicos ativos no meio acadêmico teórico e experimental, popularizando conceitos tais como ordem topológica que levam continuamente a busca de novos estados da matéria com ordem topológica, sendo um dos temas centrais atualmente em pesquisas de física de matéria condensada.

Efeito Hall Quântico Fracionário

Dois anos após a descoberta do efeito Hall Quântico, o chamado efeito Hall Quântico fracionário foi descoberto em 1982 por D.C. Tsui et al.^[45]; em que a interação entre os elétrons passa a se tornar relevante para o sistema, se tratando de um sistema fortemente correlacionado. Utilizando heteroestruturas GaAs-(AlGa)As de alta pureza e condições mais extremas de campo magnético ($\approx 20T$) e temperatura ($\approx 0,48K$) foi possível se observar que o sistema passou a apresentar uma condutividade Hall quantizada e que se verificava também em $N = 1/3$ um platô na condutividade, no ano seguinte D.C. Tsui et al.^[46] também verificou o platô fracionário para $N = 2/3$ com maior precisão. Do ponto de vista teórico se fez necessário levar em conta as interações elétron-elétron para justificar os platôs fracionados, portanto a Hamiltoniana que descreveria tal sistema é dada por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} \sum_i \left[\left(\vec{p}_i - e\vec{A}(r_i) \right)^2 + V_{imp}(\vec{r}_i) \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (29)$$

onde consideramos $V_{imp}(\vec{r}_i)$ como o potencial aleatório causado pelas impurezas do material, e $V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ representado pelo somatório $i < j$ contido no último termo da equação (29) é o potencial associado a interação elétron-elétron. O que justifica essa forte correlação é que diferente do efeito Hall quântico inteiro no qual a energia potencial da interação elétron-elétron é negligenciável em frente a energia cinética ciclôtrônica dada por $\omega_c = \frac{eB}{m_e c}$, no efeito Hall Quântico fracionário é a energia cinética ciclôtrônica que é negligenciável e $V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ já não pode mais ser ignorado, devido a maior proximidade entre elétrons e portanto uma maior correlação.

A primeira aproximação a fim de resolver a equação (29) foi desenvolvida por Laughlin em 1983^[47], permitindo relacionar os estados dos níveis de Landau com a condução hall fracionária $\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}$, sendo ($N = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \frac{2}{3} \dots$), Figura 16. Assim, em 1998^[48], D.C. Tsui recebeu o Nobel em física juntamente com H.L. Störmer e R.B. Laughlin, pelos estudos relacionados aos fluidos quânticos, presentes no efeito Hall Quântico fracionário, assim como também em hélio líquido ou em processos de supercondutividade; no qual devido a interação elétron-elétron, baixas temperaturas e intenso campo magnético, os elétrons no sistema passam a se comportar como quase-partículas cujas cargas são frações da carga do elétron, contidas em um fluido quântico incompressível.

2.6 Efeito Hall Quântico de Spin

O grande interesse no estudo de transições de fase topológica fomentou a busca por novos estados topológicos da matéria, culminando na predição teórica do efeito HQS no grafeno por

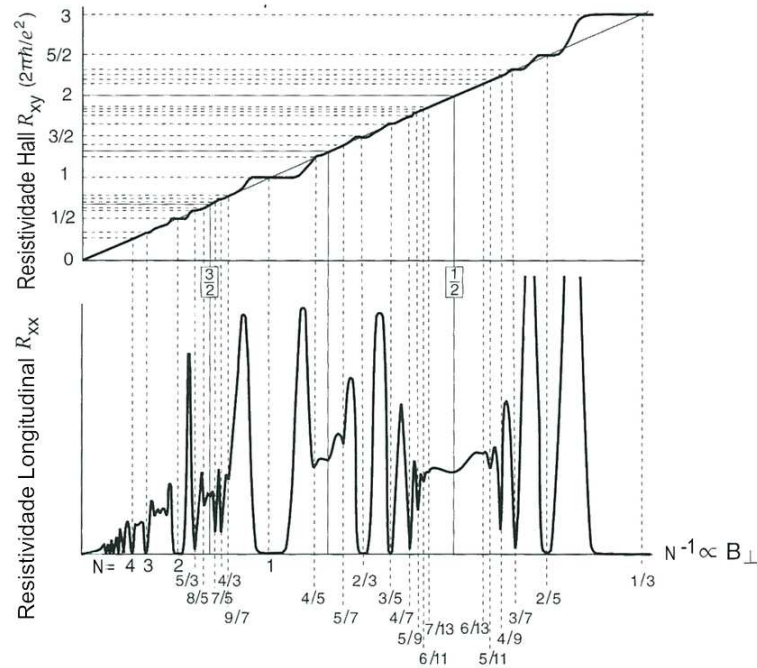


Figura 16: Resistência Hall e Longitudinal dadas em função do campo magnético para o efeito Hall Quântico Fracionário, em que N caracteriza cada nível quantizado^[15].

Charles Kane e Eugene Mele em 2005^[3]. No entanto, o acoplamento spin-órbita fundamental para o efeito HQS no grafeno é muito fraco, porém Bernevig et al. em 2006^[4] descobriu que o Telureto de Mercúrio (HgTe) com forte acoplamento spin-órbita em poço quântico com Telureto de Cádmio (CdTe) poderia levar à inversão de bandas, e consequentemente, à transição de fase topológica para o efeito HQS.

Esse novo estado de matéria topológica possui um *bulk* isolante com um gap de energia entre as bandas de valência e condução, porém nas bordas do material esse gap de energia é inexistente. O interior possui condução Hall efetiva nula, porém as bordas permanecem condutoras, apresentando uma corrente de spin efetiva não nula. O estado HQS é topologicamente imune a impurezas não-magnéticas e perturbações geométricas nas bordas do sistema de modo que não existe perdas de informação no fluxo de corrente de spin, implicando em um estado de borda não localizado com índice de transmissão 1 para os elétrons, de modo a preservar a simetria de reversão temporal^[49].

Diferentemente do efeito HQ, o efeito HQS não quebra a simetria de reversão temporal e possui portanto uma corrente Hall efetiva $\sigma_{xy} = 0$. Entretanto, devido aos efeitos de acoplamento spin-órbita, existe uma corrente de spin nas bordas em que spins de sentidos opostos se deslocam em sentidos contrários. Uma maneira de se tentar compreender o transporte de cargas é fazendo uma analogia com o efeito HQ, como se fosse a sobreposição

contrária de dois efeitos HQ sendo um para cada sentido de spin, conforme representação da Figura 17. Apesar desse novo estado da matéria possuir algumas semelhanças com o efeito HQ, existem várias diferenças entre eles^[49].

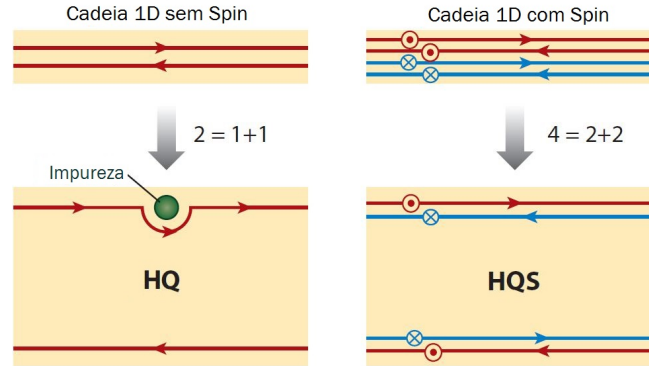


Figura 17: Analogia entre o transporte de cargas nas bordas no efeito HQ e HQS, através das simbólicas equações $2 = 1 + 1$ (movimento para frente)+1 (movimento para trás) para o HQ, enquanto $4 = 2 + 2$ no HQS leva em conta a corrente de spin^[1].

O acoplamento spin-órbita é responsável pela atuação do campo magnético no efeito HQS, pois do ponto de vista do elétron, o próton possui um campo magnético que é dado pela lei de Biot-Savart:

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}, \quad (30)$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo, r a distância em relação ao próton e $I = e/T$ é a corrente eficaz dada pela carga e do próton e seu período de órbita T . Temos também que do referencial do próton, o momento angular orbital do elétron $L = 2\pi m_e r^2/T$ aponta na mesma direção que o campo magnético do próton, portanto:

$$\vec{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{m_e c^2 r^3} \vec{L}. \quad (31)$$

Tendo o campo magnético dado em função do momento angular orbital do elétron na equação (31), podemos construir a Hamiltoniana da interação spin-órbita levando em conta a correção cinemática da precessão de Thomas e considerando a razão giromagnética $\vec{\mu}_e = -(e/m_e)\vec{S}$ do elétron com a correção relativística de Dirac, sendo \vec{S} o momento angular do spin do elétron, obtendo então a seguinte Hamiltoniana^[50]:

$$\mathcal{H}_{so} = -\frac{\vec{\mu}_e \cdot \vec{B}}{2} = \frac{e}{2m_e} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e^2 c^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (32)$$

Devido a interação do spin do elétron com o campo magnético \vec{B} na Hamiltoniana da equação (32), teremos que do referencial dos elétrons cada componente (spin *up* e *down*) irá sentir

o campo magnético \vec{B} em direções opostas gerando uma corrente efetiva de Spin, mas uma corrente Hall nula e com isso preservando a simetria de reversão temporal.

A equação (32) representa a interação spin-órbita em um átomo, podendo ser remodelada para um material específico. No caso do grafeno, pode ser reescrita em função da intensidade do acoplamento spin-órbita Δ_{so} e da função de onda da energia do elétron ψ , a fim de deixar explícito essa magnitude de interação, pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_{so} = \Delta_{so} \psi^\dagger \sigma_z \tau_z S_z \psi, \quad (33)$$

sendo σ_z e τ_z matrizes de Pauli, no qual o termo $\tau_z = \pm 1$ (simetria de isospin) descreve estados nos pontos chamados K(K') da zona de Brillouin e $\sigma_z = \pm 1$ as subredes A(B) da rede cristalina do grafeno, S_z é o spin do elétron na direção z . Portanto, a intensidade Δ_{so} e orientação do spin se fazem fundamentais para a verificação do estado topológico correspondente ao efeito HQS, sendo que o efeito HQS primeiramente teorizado por Kane e Mele para existir no grafeno é extremamente fraco devido ao carbono ser um material leve, diferentemente dos poços quânticos de Telureto de Mercúrio (HgTe) teorizado por Bernevig et al^[3].

Experimentalmente o estado HQS, ou ITB, foi descoberto em poços quânticos de Telureto de Mercúrio (HgTe) com Telureto de Cádmio (CdTe), por König et al. em 2007^[5]. Consistindo em uma camada de baixa espessura de HgTe entre duas camadas CdTe, tipo sanduíche, conforme a Figura 18, que devido a bandas de condução e valência serem invertidas nesses compostos existirá uma dada espessura $d \approx 6,3nm$ em que não haverá gap de energia e portanto o invariante topológico sofrerá transição.

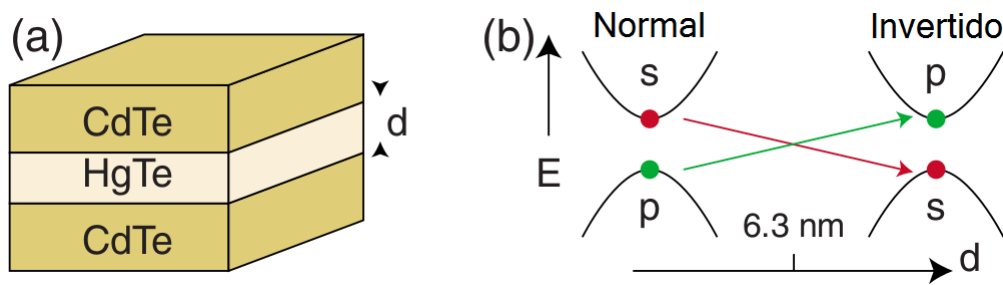


Figura 18: (a) Esquemática da estrutura tipo sanduíche de HgTe e CdTe; (b) Espessura d em função da inversão de bandas, sendo s o orbital dos elétrons de condução e p o orbital dos elétrons de valência, com uma inversão dos orbitais do HgTe para uma espessura maior que $d \approx 6,3nm$ ^[35].

Nessas condições, as bordas passam então a serem insensíveis à desordens não magnéticas, conduzindo uma corrente efetiva de Spin $J_s = (\hbar/2c)(J_\uparrow - J_\downarrow)$ conjuntamente associada à

uma condutividade Hall nula. Esse experimento foi realizado à temperaturas próximas do zero absoluto (0,03K e 1,8K) para evidenciar os efeitos quânticos, porém com $B_{ext} = 0T$, significando que não foi necessário a aplicação de um campo magnético externo já que a interação spin-órbita é o agente responsável pelo campo magnético atuante^[2].

Simetria de Reversão Temporal e Teorema de Kramers

O efeito Hall Quântico de Spin é invariante sob transformações temporais ($t \rightarrow -t$), propriedade que corresponde à simetria de reversão temporal \mathcal{T} , incluindo a invariabilidade da corrente efetiva de Spin $J_s = (\hbar/2c)(J_\uparrow - J_\downarrow)$ sob tal transformação, já que $\sigma_{xy} = 0$. Para spins inteiros e semi-inteiros, a simetria \mathcal{T} é representada pelo seguinte operador^[51] :

$$\mathcal{T} = e^{\left(\frac{i\pi S_y}{\hbar}\right)} K, \quad (34)$$

no qual S_y é o operador de spin e K é um operador que quando aplicado responde ao complexo conjugado da função ou matriz $K\psi = \psi^*$, de modo específico temos que para spins bosônicos $\mathcal{T} = K$ e fermiônicos de spin 1/2 $\mathcal{T} = -i\sigma_y K$. Para spins 1/2 de nosso modelo, temos uma importante condição:

$$\mathcal{T}^2 = [-i\sigma_y K]^2 = -1, \quad (35)$$

que está diretamente relacionada aos estados helicoidais protegidos topologicamente e ao teorema de Kramers. O teorema de Kramers está associado à degenerescência existente entre os spins *up* e *down*, de forma que todos os autoestados de uma Hamiltoniana que satisfaça a condição $[\mathcal{H}, \mathcal{T}] = 0$ são ao menos duas vezes degenerados. Uma prova por absurdo é facilmente obtida se considerar um estado $|\psi\rangle$ não degenerado. Se $\mathcal{T}|\psi\rangle = c|\psi\rangle$, com c uma constante, quando aplicamos a condição (35) teremos que $\mathcal{T}^2|\psi\rangle = |c|^2|\psi\rangle$ o que é impossível já que $|c|^2 \geq 0 \neq -1$. Portanto isso implica que um autoestado $|\psi_t\rangle$ com uma dada energia E , deve possuir um autoestado associado a sua reversão temporal $\mathcal{T}|\psi_t\rangle = |\psi_{-t}\rangle$ que possua a mesma energia e que sejam ortogonais entre si $\langle\psi_{-t}|\psi_t\rangle = 0$, esse par de autoestados é conhecido como pares de Kramers e leva exatamente a degenerescência nos níveis de energia para os pares com reversão temporal^[51].

A degenerescência de Kramers com a interação spin-órbita é mais complexa, pois implica em um estado degenerado em pontos especiais de simetria Γ da zona de Brillouin ($k = 0, k = \pm\pi$) devido ao momento k nesses pontos ser invariante a \mathcal{T} com a degenerescência de rede $k = -k + G$, sendo G o vetor de rede. Devido à equivalência desses pontos por conta da degenerescência de Kramers, ao considerarmos a ligação entre esses estados, teremos duas possibilidades, Figura 19, quando são conectados na energia de Fermi entre as bandas de

valência e condução cruzando um número par ou ímpar de estados de borda, ao cruzar um número par os estados de borda podem ser eliminados por perturbação colocando-os fora do gap de energia de modo que temos um estado isolante trivial, já quando se cruza um número ímpar tal estado de borda não pode ser eliminado e por isso é protegido pela simetria \mathcal{T} e temos então um estado isolante topológico^[35].

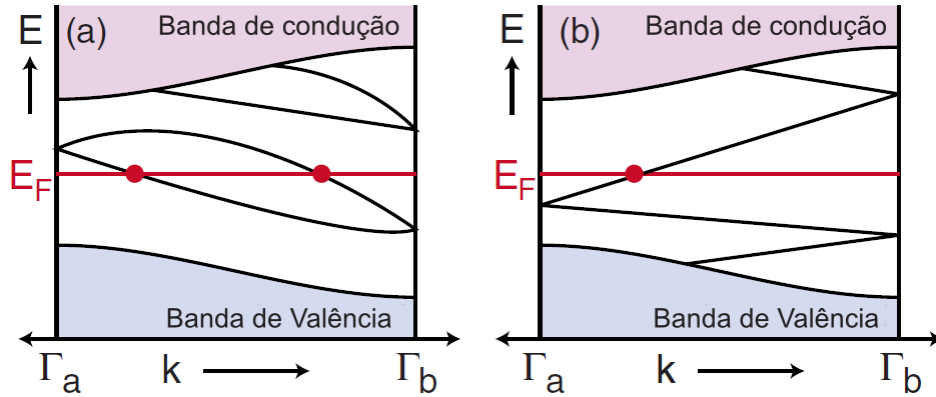


Figura 19: Estrutura de bandas mostrando a dispersão para os pontos degenerados de Kramers $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi$, para o caso (a) em que a energia de Fermi cruza os estados de superfície em um número par e em (b) ímpar. No qual o último caso leva a estados de borda metálico protegido topologicamente^[35].

Tais estados de borda metálico não podem ser localizados, mesmo que existam impurezas não-magnéticas ou desordens na amostra, impedindo também qualquer possibilidade de retroespalhamento, tal estado metálico de borda é topologicamente protegido. Para provar que é impossível existir retroespalhamento em tal estado topologicamente protegido, considere o caso de um elétron com spin up se propagando no sentido positivo e suas duas possíveis reflexões por uma impureza não magnética, Figura 20, no qual cada espalhamento possível muda o sentido do spin por uma rotação adiabática de $|\pi|$, no sentido horário ou anti-horário. Porém, considerando o operador \mathcal{T}^2 para férmions, o par de autoestados associados à rotação dos dois possíveis caminhos irão se diferir por uma fase completa da função de onda por $\pi - (-\pi) = 2\pi$, e tal rotação de fase levaria à inversão do spin, entretanto as duas possíveis fases também levam à uma interferência destrutiva da função de onda $\langle \psi_{-t} | \psi_t \rangle = 0$, já que os autoestados para os pares de Kramers devem ser ortogonais, e portanto a única possibilidade é que a transmissão do elétron pela impureza tenha probabilidade 1 e ele não sofra retroespalhamento, com a consequência de tais autoestados não serem localizados^[49].

Vale considerar que uma impureza magnética ao interagir com o elétron, não garante preservar a interferência destrutiva entre os estados helicoidais retroespalhados, já que a rotação não será mais adiabática por conta da interação entre o momento magnético da

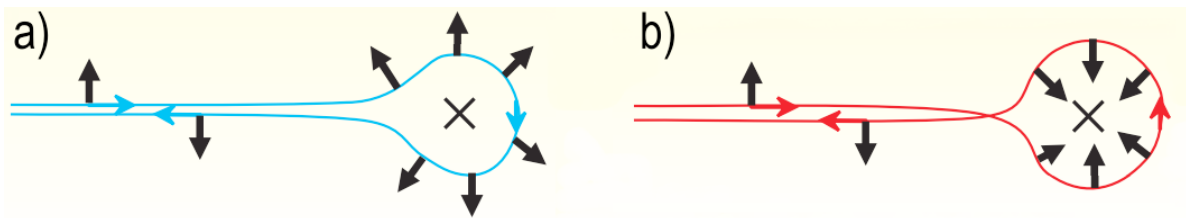


Figura 20: Um elétron refletido pela impureza representada por \times , muda o sentido de rotação por uma fase completa de 2π do autoestado da função de onda, devido a suas duas possíveis rotações de spin. *a)* contornando no sentido horário por uma rotação de π do spin, *b)* contornando no sentido anti-horário por uma rotação de $-\pi$ do spin; sendo as duas possibilidades de retroespalhamento^[49].

impureza com o do spin e portanto surgirá um coeficiente de reflexão, assim como a condição $\langle \psi_{-t} | \psi_t \rangle = 0$ não valerá mais, já que a simetria de reversão temporal será violada.

Um ponto interessante que pode ser levado em consideração é o que aconteceria se tivéssemos a condição de simetria de reversão temporal, diferentemente de (35), associada aos spins bosônicos:

$$\mathcal{T}^2 = K^2 = 1, \quad (36)$$

para tal caso, se verifica diretamente que o teorema de Kramers não se aplica e portanto não existe uma proteção topológica conhecida associada para um modelo que possuísse estados de borda com condução helicoidal, já que tal Hamiltoniana poderia ser deformada de modo a fechar um gap de energia existente sem que se viole a simetria de reversão temporal através de um estado $|\psi\rangle$ não degenerado^[52].

O operador de simetria \mathcal{T} deve satisfazer uma restrição na Hamiltoniana de duas bandas para o efeito Hall Quântico de Spin:

$$\mathcal{T}\mathcal{H}(k)\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}(-k), \quad (37)$$

impondo a todo um conjunto de Hamiltonianas que se transformam adiabaticamente (sem fechar o gap de energia associado ao estado) na mesma fase topológica da matéria correspondente ao invariante TKNN $n = 0$. Entretanto, existe outro invariante que permite catalogar o conjunto de Hamiltonianas (37) em duas classes topológicas, chamado invariante \mathbb{Z}_2 ^[51].

Invariante Topológico \mathbb{Z}_2

A robustez associada aos estados de borda no efeito Hall Quântico de Spin está relacionado à sua proteção topológica, de forma que existe um invariante associado que permita distinguir

tal estado topológico de um estado isolante trivial. A topologia do Efeito Hall quântico de spin é associada ao invariante topológico chamado \mathbb{Z}_2 , devido à característica de poder assumir apenas dois possíveis valores no conjunto dos números inteiros. Entretanto, existem diversas formas de se definir tal invariante, pelos trabalhos de Kane e Mele em 2005^[3], de Fu e Kane em 2006^[53] e 2007^[54], de Fukui e Hatsugai em 2007^[55], Moore e Balents também em 2007^[56], Fukui et al. em 2008^[57], Qi et al. também em 2008^[58], Roy em 2009^[59] e por fim, Wang et al. em 2010^[60]. A melhor escolha de definição para a forma mais simples de se definir tal invariante irá depender do material em questão, das simetrias associadas a sua estrutura e do modelo. Por questão de simplificação, iremos expressar a definição de Fu e Kane (2006), no qual o invariante \mathbb{Z}_2 é expresso por ν contido na formula^[53] :

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]}, \quad (38)$$

no qual w é uma matriz unitária definida de modo geral como $w_{mn}(k) = \langle u_m(k) | \mathcal{T} | u_n(-k) \rangle$, com \mathcal{T} o operador anti-unitário da simetria de reversão temporal, sendo aplicada em quatro pontos especiais Γ_i onde k e $-k$ coincidem na zona de Brillouin; devido a relação de que o determinante de (38) ser dado em uma matriz anti-unitária, sua solução é equivalente a sua pfaffian ($\text{Pf}[w(\Gamma_i)]^2 = \det[w(\Gamma_i)]$ para matriz anti-simétrica), portanto a solução do produtório da divisão somente pode ser ± 1 implicando no invariante \mathbb{Z}_2 ser limitado ao conjunto de solução par ou ímpar.

Caso o sistema tenha uma simetria de quiralidade, tal que $\sigma_z \mathcal{H}(K) \sigma_z^{-1} = -\mathcal{H}(K)$, é possível definir de modo mais simples o invariante \mathbb{Z}_2 , pois apesar de o invariante TKNN ser $n = 0$ devido a $\sigma_{xy} = 0$, devido à simetria \mathcal{T} preservada será possível definir o invariante TKNN de modo independente para os spins *up* n_\uparrow e *down* n_\downarrow de modo que^[51] :

$$\nu = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2} \text{mod} 2 = n_{sH} \text{mod} 2, \quad (39)$$

sendo dado portanto pela congruência de módulo 2 entre os dois tipos de invariantes, ou basicamente ν é obtido como a parte inteira do resto da divisão de n_{sH} por 2. Assim, $\nu = 0$ ou 1 dependendo do valor de n_{sH} , que se relaciona à uma condutividade spin hall quantizada^[61] :

$$\sigma_{sH} = \pm n_{sH} \frac{e}{4\pi}, \quad (40)$$

cujo sinal irá depender do sinal do potencial de acoplamento spin-órbita, sendo por exemplo $n_{sH} = 2$ para uma camada simples de grafeno no modelo de Haldane de duas componentes, que será explicado mais a frente.

Materiais com o efeito Hall Quântico de spin com tal proteção topológica, que implica no

estado isolante no *bulk* e na condução metálica e helicoidal nas bordas, é o que chamamos de isolantes topológicos bidimensionais. Cujas propriedades de corrente de spin faz desses materiais de grande potencial para futuras aplicações na área de spintrônica.

2.7 Isolantes Topológicos Tridimensionais

Os isolantes topológicos bidimensionais podem ser generalizados para três dimensões, chamados apenas de isolantes topológicos, no qual os estados metálicos de borda passam a ser estados metálicos de superfície, preservando a simetria de reversão temporal e permanecendo igualmente o estado isolante no *bulk*[56, 59, 62].

Ao definir o invariante \mathbb{Z}_2 para o isolante topológico, teremos que em vez de um único plano na zona de Brillouin, seis planos ($x = 0, x = \pm\pi, y = 0, y = \pm\pi, z = 0, z = \pm\pi$) cada qual associado a um invariante topológico \mathbb{Z}_2 para cada plano. Entretanto, os 6 invariantes correspondentes à cada plano não são independentes, devido à questão de simetria em (38) ao qual é aplicada em pontos especiais Γ_i onde k e $-k$ coincidem na zona de Brillouin, assim $x_0 x_{\pm\pi} = y_0 y_{\pm\pi} = z_0 z_{\pm\pi}$, implicando em três invariantes atrelados, de forma que ao todo existem quatro invariantes independentes. Assim, os invariantes que são necessários para classificar um isolante topológico são $4\mathbb{Z}_2 = (\nu_0 : \nu_1 \nu_2 \nu_3)$ [56, 62, 63].

A fórmula (38) para o invariante \mathbb{Z} pode ser generalizado para o isolante topológico tomando oito pontos especiais na zona de Brillouin, ou quatro pontos invariantes sob \mathcal{T} devido à degenerescência de Kramers, $\Gamma_{1,2,3,4}$ na superfície da zona de Brillouin, Figura 21, em que a degenerescência é quebrada fora desses pontos devido a interação spin-órbita. Sendo $\nu = \text{mod}2 = 0$ ou 1, temos ao todo dezesseis possíveis fases topológicas associadas à um isolante topológico, entretanto, apenas uma das fases topológicas é realmente robusta em relação à simetria de reversão temporal, ν_0 , ficando apenas duas fases topológicas distintas possíveis que corresponde $\nu_0 = 0$ ao isolante trivial (ou isolante topológico fraco) e $\nu_0 = 1$ ao isolante topológico (ou isolante topológico forte), correspondendo respectivamente a um número par (fraco) e ímpar (forte) de pontos de Dirac com degenerescência de Krammer contidos no círculo de Fermi na superfície da zona de Brillouin. Os pontos de Dirac são basicamente os pontos de simetria da zona de Brillouin que tocam conjuntamente a banda de valência e de condução, cuja projeção linear de energia na zona de Brillouin é chamada de cone de Dirac^[51].

O isolante topológico fraco ($\nu_0 = 0$) é o mais simples modelo de isolante topológico, construído a partir de camadas sobrepostas do isolante topológico bidimensional. Nesse caso, os estados de borda helicoidais das camadas se tornam estados de superfície anisotrópicos devido a não preencherem os três planos independentes do momento, correspondendo ao eixo ao qual as camadas são sobrepostas, por exemplo, o eixo- y na Figura 21 (a). Considere o

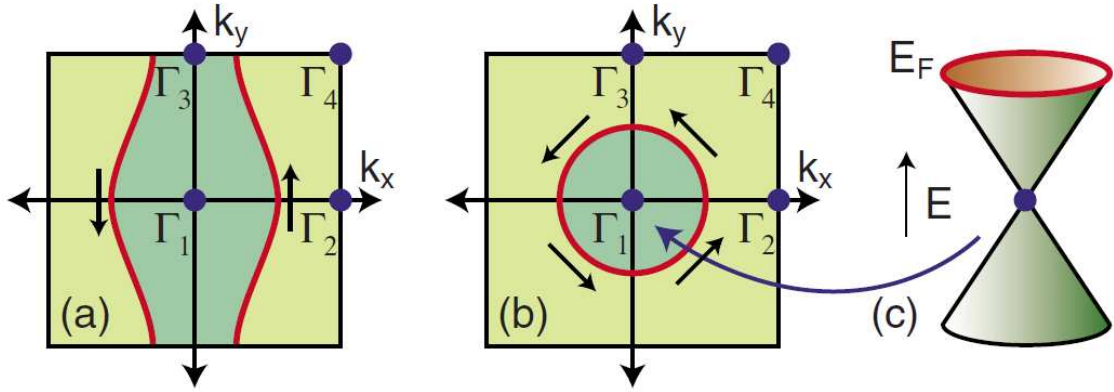


Figura 21: Representação dos círculos de Fermi em (a) para um isolante topológico fraco e em (b) para um forte. Em (c) temos um cone de Dirac com um único ponto de Dirac exemplificando o caso mais simples de um isolante topológico forte^[35].

caso de camadas λ sobrepostas de $\nu = n$ estados Hall Quântico possuindo uma condutividade hall e^2/h , é possível descrever para esse caso um tensor de condutividade em função da rede recíproca, $\sigma_{\mu\nu} = \frac{e^2}{2\pi h} \epsilon_{\mu\nu\lambda} G_\lambda$, sendo a rede associada às camadas $G = (2\pi/d)n\hat{n}$ com d a distância entre as camadas perpendicular a \hat{n} , nesse caso a rede recíproca é então especificada por três números de Chern, para caracterizar cada plano independente de momento^[64]. Podemos associar de modo semelhante para o isolante topológico fraco, com $3\mathbb{Z}_2 = (\nu_1\nu_2\nu_3)$ como os índices de Miller no vetor de rede recíproca:

$$G^\nu = \nu_1 a_1 + \nu_2 a_2 + \nu_3 a_3, \quad (41)$$

sendo G^ν as camadas de rede e a_i os vetores primitivos da rede recíproca. Por (41) vemos que $(\nu_1\nu_2\nu_3)$ correspondem à uma mudança de polarização no mesmo plano e não são relevantes para caracterização topológica por corresponderem uma mudança na escolha da rede recíproca, não possuindo robustez em relação à simetria de reversão temporal, entretanto o estado de superfície permanece metálico.

Já o isolante topológico forte ($\nu_0 = 1$) não pode ser construído a partir de camadas sobrepostas do isolante topológico bidimensional, sendo determinado pelo número ímpar de pontos de Dirac contidos no círculo de Fermi na superfície da zona de Brillouin, Figura 21 (b). Tais estados metálicos de superfície são metade de um metal comum, já que na superfície de Fermi os estados de spin não são degenerados devido ao acoplamento spin-órbita e a fase de Berry π em tal estado leva a um estado de superfície não localizado (fraca antilocalização) mesmo para fortes desordens não magnéticas.

Existem vários materiais ao qual se foi proposto teoricamente serem isolantes topológicos,

sendo o primeiro proposto em 2007^[54] por Liang Fu e Kane para uma liga de Bismuto e Antimônio ($Bi_{1-x}Sb_x$) em uma escala especial de $0,07 < x < 0,22$, Figura 22, no qual quando o metal representativo Bismuto é dopado e a concentração aumenta para $x \simeq 0,04$ o gap entre as bandas se fecha e quando $x \simeq 0,07$ as bandas se invertem produzindo o estado topológico descrito por $4\mathbb{Z}_2 = (1 : 111)$, já quando a concentração é maior que $x \simeq 0,22$ o nível de Fermi irá subir acima da banda de condução voltando ao estado semimetálico. A liga de $Bi_{1-x}Sb_x$ foi experimentalmente provada em 2008^[65] ser um isolante topológico através da técnica ARPES (Angle Resolved Photoemission Spectroscopy), Figura 23 (a), que permite sondar as energias e os momentos permitidos dos elétrons na amostra e com isso mapear o *bulk* e superfície, a fim de detectar sua fase topológica. Entretanto, do ponto de vista experimental a liga de $Bi_{1-x}Sb_x$ não é muito vantajosa devido ao baixo gap de energia do *bulk* ($\simeq 30meV$)^[66], assim outros compostos também foram propostos a isolantes topológicos, como Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 , correspondendo a segunda geração de isolantes topológicos, sendo que Bi_2Te_3 acabou não se verificando realmente um isolante topológico^[49].

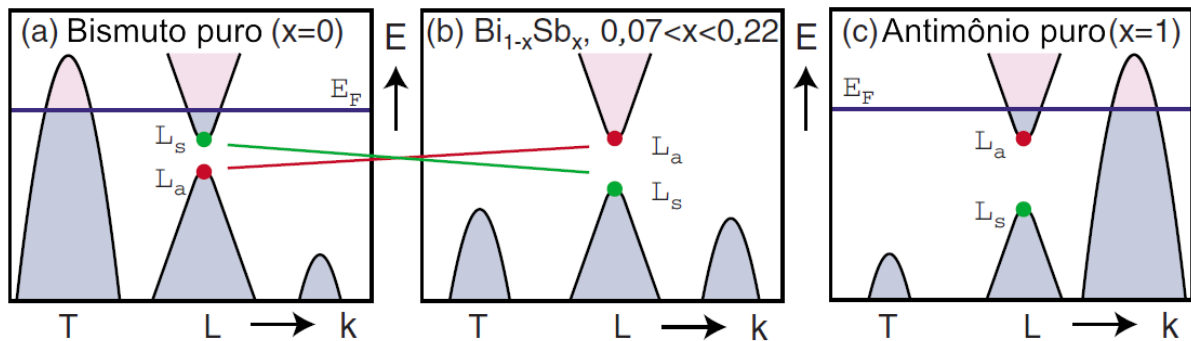


Figura 22: Inversão entre a banda de condução L_s e valência L_a do $Bi_{1-x}Sb_x$ dependente da concentração de x . (a) estado semimetálico $x = 0$, (b) estado isolante topológico $0,07 < x < 0,22$, (c) estado semimetálico $x = 1$ ^[35].

Da segunda geração de isolantes topológicos, o Bi_2Se_3 merece uma atenção especial, Figura 23 (b), devido a ter um gap de energia do *bulk* alto ($\simeq 0,3eV$) permitindo ser um isolante topológico a temperatura ambiente, e por ser um composto estequiométrico em vez de uma liga semelhante ao $Bi_{1-x}Sb_x$. Tal estado topológico no Bi_2Se_3 é devido ao forte acoplamento spin-órbita que induz uma inversão de paridade dos níveis eletrônicos e induzindo a formação dos estados metálicos de superfície do tipo férmions de Dirac sem massa^[49, 67, 68].

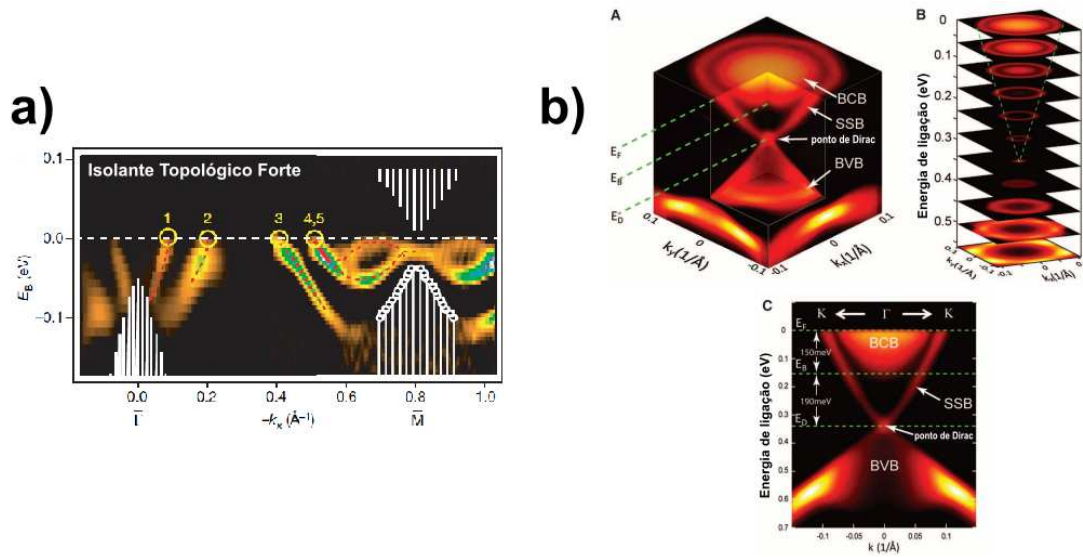


Figura 23: Medidas ARPS para isolantes topológicos de primeira (a) e segunda (b) geração. (a) Estados de superfície do $Bi_{0.9}Sb_{0.1}$ cruzando o nível de Fermi 5 vezes entre $\bar{\Gamma}$ e \bar{M} ; (b) Medidas para Bi_2Se_3 ; [A] bandas de condução (BCB) e de valência (BVB) do *Bulk*, com os estados de superfície (SSB) e o ponto de Dirac indicados; [B] camadas de estados com mesma energia; [C] estrutura de bandas evidenciando o cone de Dirac e o gap de energia do *bulk*^[65, 69].

3 Modelos e Efeitos para Sistemas Topológicos

3.1 O Modelo SSH

O modelo SSH (Su, Schrieffer e Heeger)^[70, 71] primeiramente proposto em 1979 é o mais simples modelo de duas bandas para descrição de um sistema topológico caracterizado por *winding number*, foi um modelo feito para descrever o poliacetileno, um polímero orgânico com alta condutividade elétrica. A Hamiltoniana que descreve a estrutura química do poliacetileno é dada por um modelo de ligação forte unidimensional^[51] :

$$\mathbf{H} = \sum_i \left[(t + \delta t) c_{Ai}^\dagger c_{Bi} + (t - \delta t) c_{Ai+1}^\dagger c_{Bi} + c.h. \right], \quad (42)$$

no qual a cadeia atômica é composta de monômeros constituídos com dois átomos A e B e no qual ignoramos os spins dos átomos e interação elétron-elétron a fim de simplificação do modelo. Na equação (42) o termo *c.h.* significa conjugado hermitiano e $c^\dagger c$ são os operadores criação e destruição para um dado elétron no átomo A ou B contido na célula unitária i ou $i + 1$, t a energia de salto entre primeiros vizinhos, já o sinal em δt caracteriza as duas possíveis dimerizações dada pela ligação dos pares de monômeros, estando atrelado ao gap de energia do modelo. A fim de perceber o gap de energia atrelado a dimerização do modelo, precisamos reescrever a Hamiltoniana (42) no espaço de momento $\mathcal{H}(K) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathbf{H} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, aplicando a transformada de Fourier e reescrevendo $\mathbf{H} = \sum_k \mathcal{H}_{ab}(K) c_{ak}^\dagger c_{bk}$, obtemos a seguinte Hamiltoniana de duas bandas:

$$\mathcal{H}(K) = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} d_z(k) & d_x(k) - id_y(k) \\ d_x(k) + id_y(k) & d_z(k) \end{pmatrix}, \quad (43)$$

no qual as componentes do vetor $\vec{d}(k)$ são dadas por:

$$\begin{aligned} d_x(k) &= (t + \delta t) + (t - \delta t) \cos(ka), \\ d_y(k) &= (t - \delta t) \text{sen}(ka), \\ d_z(k) &= 0; \end{aligned} \quad (44)$$

em que o parâmetro a representa o espaçamento de rede entre átomos iguais. A diferença na dimerização do modelo se torna melhor distinguível na Hamiltoniana de duas bandas, Figura 24, no qual $\delta t > 0$ implica diretamente que todos os $d_x(k)$ sejam positivos, já que o caminho do vetor $\vec{d}(k)$ não varre o centro de ângulo sólido e por isso há uma fase de Berry nula, entretanto para $\delta t < 0$ existe uma rotação de 2π entorno do centro de ângulo sólido e com isso uma fase de Berry não nula.

Podemos definir uma polarização elétrica para o sistema que está associada à fase de Berry. Na eletrostática, a polarização definida como o momento de dipolo por unidade de volume é dada para uma densidade de cargas como $\rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}$, para uma densidade superficial como $\sigma = \vec{P} \cdot \hat{n}$, com \hat{n} o vetor unitário perpendicular a superfície, e por fim, para o caso unidimensional semelhante ao modelo SSH está atrelado à uma carga de polarização nas extremidades, de modo que $Q_{ext} = P$. Porém o modelo possui condições de contorno periódicas, de modo que não é possível determinar Q_{ext} nas extremidades de modo direto, mas uma solução é fornecida através da teoria da ferroeletricidade^[72, 73, 74, 75], que permite associar a polarização com a fase de Berry das funções de onda de Bloch ocupadas em volta da zona de Brillouin unidimensional e definindo então uma fase de Berry para polarização como:

$$P = \frac{e}{2\pi} \oint_{BZ} A(k) dk, \quad (45)$$

consistindo em uma integral da fase de Berry $A(k)$ na zona de Brillouin unidimensional (S^1) resultando em uma polarização de carga de $2\pi n$ por *loop* e portanto uma ambiguidade de $P \rightarrow P + ne$, com $n \in \mathbb{Z}$, cuja solução da ambiguidade é corrigida por um calibre dado por um parâmetro que controla a estrutura de banda, que no caso da equação (43) é δt , que para o caso $\delta t > 0$ em que há uma fase de Berry nula, podemos definir para isso uma polarização $P = 0$, mas se considerarmos o caso $\delta t < 0$ no limite de forte acoplamento $t = \pm \delta t$ quando $[\delta t = +t] \rightarrow [\delta t = -t]$ teremos um estado associado ao movimento de um elétron indo de um átomo A ou B a outro igual, resultando em uma polarização $P = e/2$, levando à uma fase de Berry de π e estando diretamente associado ao *winding number*^[51].

A energia da Hamiltoniana da equação (43) é obtida a partir diagonalização da matriz bidimensional, $\mathcal{H}(K) = E(k)\mathbb{I}_2$, ao qual iremos rescrever considerando duas novas variáveis $v = t + \delta t$ e $w = t - \delta t$, a fim de facilitar a compreensão dos resultados, logo^[76] :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(K) &= \begin{pmatrix} 0 & v + w \cos(ka) - iw \sin(ka) \\ v + w \cos(ka) + iw \sin(ka) & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}, \quad (46)$$

e portanto,

$$E(k) = \pm |v + we^{-ik}| = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(k)}, \quad (47)$$

no qual o gap associado a dimerização está atrelado aos parâmetros v e w , e mostram as configurações possíveis do modelo. Nos casos em que temos $v > w$, o sistema não está

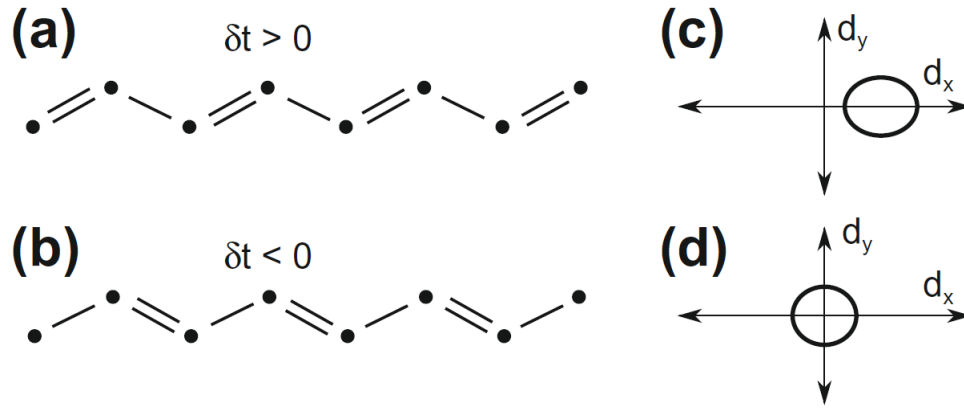


Figura 24: Estrutura do trans-poliacetileno no modelo SSH para o estado fundamental com dois casos de dimerização dados por (a) $\delta t > 0$ e (b) $\delta t < 0$, e o correspondente vetor unitário $\vec{d}(k)$ no espaço de momento com $k = 0 \rightarrow 2\pi$ para (c) no qual não varre o centro de ângulo sólido e (d) no qual a rotação de 2π leva à uma fase de Berry [51].

associado ao *winding number* e descreve um isolante comum com as duas bandas de energia separadas pelo gap, quando temos $v < w$ o sistema possui fase de Berry e um *winding number* não nulos, estando associado à um isolante de fase topológica; já no caso em que $v = w$, isso é, o estado que caracteriza a transição de fase, o modelo irá descrever um sistema condutor por não possuir um gap de energia e permitir o transporte de elétrons ao longo do polímero, Figura 25.

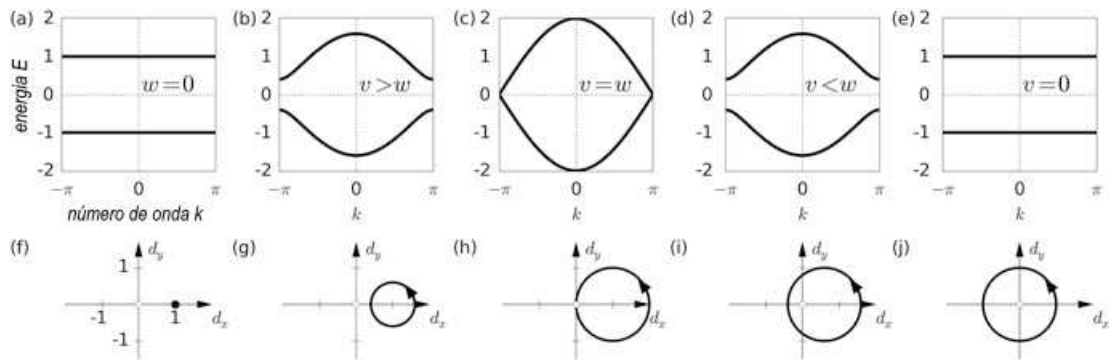


Figura 25: Diferentes dispersões dadas em função de (a) $v = 1, w = 0$; (b) $v = 1, w = 0,6$; (c) $v = w = 1$; (d) $v = 0,6, w = 1$; (e) $v = 0, w = 1$; e suas respectivas fases em $\vec{d}(k)$ com (f, g) isolante trivial; (h) condutora e (i, j) isolante topológico [76].

Dada a condição de simetria de quiralidade de uma Hamiltoniana $\mathbf{U}\mathbf{H}\mathbf{U}^{-1} = -\mathbf{H}$, sendo $\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1} = 1$, verificamos que o modelo SSH satisfaz tal condição para a matriz de Pauli σ_z , sendo a simetria de quiralidade violada na transição de fase do sistema isolante trivial para o

topológico quando $v = w$, nesse caso temos que a transição se dá quando $\vec{d}(k)$ passa pelo ponto central de ângulo sólido violando essa simetria e tornando indeterminada a equação (45), que pode ser melhor visualizada tomando somente o *winding number* do modelo (lembrando a fase de Berry dada por π)^[77] :

$$n = \frac{1}{\pi} \oint_{BZ} A(k) dk \begin{cases} n = 0 & \text{quando } v > w \\ n = 1 & \text{quando } v < w \\ n \rightarrow \textit{inexistente} & \text{quando } v = w \end{cases} . \quad (48)$$

Devido a simetria de quiralidade no modelo, $d_z(k)$ deve ser zero em todos os casos para que $\sigma_z \mathcal{H}(K) \sigma_z^{-1} = -\mathcal{H}(K)$ (ou na notação de anticomutador $\{\mathcal{H}(K), \sigma_z\} = 0$), tendo também por implicação a simetria de partícula-buraco Ξ , $\mathcal{H}(K) \sigma_z |\psi_E\rangle = -E |\psi_E\rangle \Rightarrow \sigma_z |\psi_E\rangle = |\psi_{-E}\rangle$. Porém o trans-poliacetileno real não possui tal simetria e sim a simetria de reflexão no eixo- x , $\mathcal{H}(-K) = \sigma_x \mathcal{H}(K) \sigma_x^{-1}$, ao qual não restringe $d_z(k)$ a zero desde que satisfaça $d_{y,z}(-k) = -d_{y,z}(k)$ com a condição de reflexão $d_x(-k) = d_x(k)$, não apresentando a simetria de partícula-buraco Ξ , mas preservando a polarização quantizada $P = 0$ ou $e/2$ ^[51]. Tal modelo é bastante relevante devido a exibir duas diferentes fases topológicas, no qual podem ser caracterizadas pelo *winding number* e a transição entre as fases é observada quando o gap de energia entre as bandas é fechado.

3.2 O Modelo de Haldane

O modelo de Haldane feito em 1988^[78] a partir da descrição do grafeno em um campo magnético periódico interno, apresenta uma condução Hall σ_{xy} não nula na ausência de um campo magnético externo, permitindo uma descrição no modelo de bandas para o efeito Hall Quântico e um passo fundamental na descrição do efeito Hall Quântico de spin.

No modelo de interação forte, iremos considerar uma folha de grafite bidimensional em uma rede hexagonal, possuindo dois átomos (A, B) por célula unitária e levando em consideração as interações entre segundos vizinhos, Figura 26 (a), de forma que obtemos ($\hbar = 1$)^[79] :

$$\mathbf{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{\sigma, Ai}^\dagger c_{\sigma, Bj} + c.h. \right) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left(c_{\sigma, Ai}^\dagger c_{\sigma, Aj} + c_{\sigma, Bi}^\dagger c_{\sigma, Bj} + c.h. \right), \quad (49)$$

no qual o termo $c.h.$ significa conjugado hermitiano, $c^\dagger c$ são os operadores criação e destruição para um dado elétron com spin σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) no átomo A ou B contido na célula unitária i ou j , t e t' a energia de salto entre primeiros e segundos vizinhos respectivamente, com somas restritas a primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$ e segundos vizinhos $\langle\langle i, j \rangle\rangle$. No qual as bandas de energia

para a Hamiltoniana (49) são dadas por^[79, 80] :

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\vec{k}) &= \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}), \\ f(\vec{k}) &= 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right); \end{aligned} \quad (50)$$

sendo a o espaçamento de rede e o sinal dependente da banda em questão. Podemos obter no espectro de energia (50), Figura 26 (b), a simetria de inversão \mathcal{P} quando $t' = 0$, já para valores finitos de t' surgirá a quebra da simetria Ξ , assim como \mathcal{P} será quebrado através de uma assimetria em relação a energia zero, tal espectro apresenta pontos de Dirac nos pontos de simetria \mathbf{K} e \mathbf{K}' da rede recíproca na zona de Brillouin.

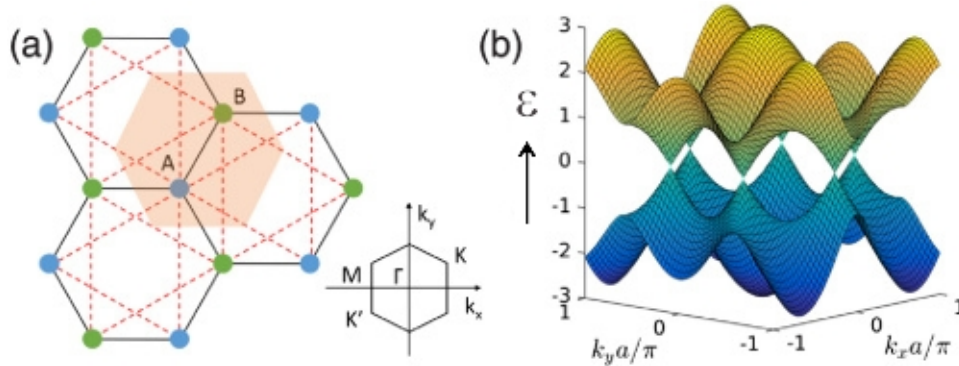


Figura 26: (a) rede hexagonal contendo os sítios A e B da célula primitiva (hexágono laranja), e as interações de segundos vizinhos (tracejado em vermelho), ao canto tem a rede recíproca com os pontos de simetria. (b) estrutura de bandas para $t' = 0$, mostrando seis cones de Dirac^[81].

Para efeitos de simplificação no modelo, a fim de descrever as propriedades do efeito Hall quântico e as implicações para o efeito Hall quântico de Spin desassociadamente, iremos levar apenas em conta apenas os orbitais p_z de cada átomo, não levando em consideração o spin dos elétrons, considerando como conjunto vazio ($\sigma = \emptyset$) e somente tomando em conta as interações entre primeiros vizinhos ($t' = 0$), de forma que tal simplificação em (49) resulta em^[51] :

$$\mathbf{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c_{Ai}^\dagger c_{Bj} + c.h. \right), \quad (51)$$

reescrevendo a Hamiltoniana (51) no espaço de momento $\mathcal{H}_0(K) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathbf{H}_0 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, aplicando a transformada de Fourier e reescrevendo $\mathbf{H}_0 = \sum_k \mathcal{H}_{ab}(K) c_{ak}^\dagger c_{bk}$, obtemos a Hamiltoniana de

duas bandas $\mathcal{H}_0(K) = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}$ no qual as componentes do vetor $\vec{d}(k)$ são dadas por:

$$\begin{aligned} d_x(k) &= -t \sum_{i=1}^3 \cos \vec{k} \cdot \vec{A}_i, \\ d_y(k) &= -t \sum_{i=1}^3 \sin \vec{k} \cdot \vec{A}_i, \\ d_z(k) &= 0; \end{aligned} \quad (52)$$

sendo \vec{A}_i os vetores de rede da rede. O vetor $\vec{d}(k)$ devido a $t' = 0$ apresenta a simetria de inversão \mathcal{P} que requer $d_z(k) = -d_z(-k)$ e devido à simetria de reversão temporal \mathcal{T} requerer $d_z(k) = +d_z(-k)$, temos que $d_z(k)$ deve ser nulo e com isso existindo pontos de $\vec{d}(k)$ que podem ser nulos, no caso os pontos de simetria \mathbf{K} e \mathbf{K}' ($\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$) da rede recíproca na zona de Brillouin.

Para chegar no modelo contínuo de baixas energias, iremos considerar uma pequena perturbação $\vec{q} \equiv \vec{k} - \vec{k}'$, que corresponde ao vetor $\vec{d}(\vec{q}) = v_F \vec{q} \cdot \vec{\sigma}$, com $\hbar v_F = 3ta/2$, de forma que obteremos uma Hamiltoniana de Dirac sem massa quando aplicado $\vec{q} \rightarrow -i\vec{\nabla}$ ^[51] :

$$\mathcal{H}_0 = -i\hbar v_F (\sigma^x \tau^z \partial_x + \sigma^y \partial_y) = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \tau^z \partial_x - i\partial_y \\ \tau^z \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (53)$$

sendo v_F a velocidade de Fermi associada ao movimento do elétron sob um campo elétrico e $\tau^z = \pm 1$ para estados próximos de \mathbf{K} e \mathbf{K}' . O espectro de energia de tal modelo leva diretamente a $E(\vec{q}) = \pm \hbar v_F |\vec{q}|$, que apresenta a dispersão de energia linear correspondendo ao cone de Dirac, Figura 27 (a), com a interessante propriedade de que $\vec{q} = \vec{0}$ é protegido pelas simetrias \mathcal{P} e \mathcal{T} tendo relação direta com o efeito Hall quântico de Spin por apresentar uma banda de condução semelhante com a exceção da corrente de spins devido a se ignorar o acoplamento spin-órbita nesse modelo, já que foi desconsiderado os spins do elétron.

Se considerarmos uma violação de simetria, podemos chegar ao efeito Hall quântico ou a um isolante trivial. A quebra de simetria \mathcal{P} é possível se os átomos A e B não forem equivalentes, acrescentando ao modelo contínuo um termo de massa que inclui uma perturbação $\Delta \mathcal{H}_0^{\mathcal{P}} = m_{\mathcal{P}} \sigma^z$ gerando uma abertura de gap de $2|m_{\mathcal{P}}|$ no espectro de energia $E(\vec{q}) = \pm \sqrt{|\hbar v_F \vec{q}|^2 + m_{\mathcal{P}}^2}$, Figura 27 (b), reduzindo ao espectro de energia de um isolante trivial. Já a quebra de simetria \mathcal{T} é possível pela aplicação de um campo magnético periódico interno de forma que na média seja nulo e preserve toda a simetria espacial de rede (associado a interação de segundos vizinhos), induzindo um termo de massa de sinais contrários nos pontos de Dirac que inclui uma perturbação $\Delta \mathcal{H}_0^{\mathcal{T}} = m_{\mathcal{T}} \sigma^z \tau^z$ que não gera uma abertura de gap de energia, mas induz uma condutividade Hall $\sigma_{xy} = \pm ne^2/h$ descrevendo

o efeito Hall quântico. Se levarmos em conta o acoplamento spin-órbita pela perturbação $\Delta \mathcal{H}_0^{SO} = m_{SO} \sigma^z \tau^z S^z$, teremos a preservação das simetrias \mathcal{P}, \mathcal{T} e consequentemente o efeito Hall quântico de Spin^[51, 78].

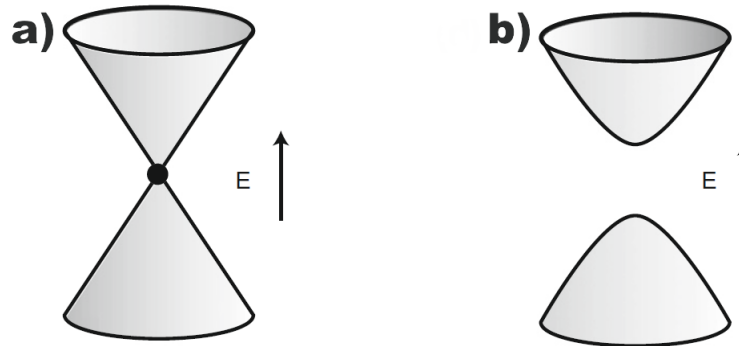


Figura 27: (a) cone de Dirac para o grafeno, podendo ou não apresentar a simetria \mathcal{T} . (b) violação da simetria \mathcal{P} no grafeno, levando a um estado de isolante trivial com um gap de $2|m_{\mathcal{P}}|$ no espectro de energia^[51].

É interessante levar em conta que no grafeno a banda de valência toca a banda de condução em dois pontos distintos da zona de Brillouin e que nas bordas a dispersão é linear como partículas relativísticas sem massa, sendo tais partículas descritas pela equação de Dirac^[82, 83]. Eletronicamente tal material é interessante do ponto de vista tecnológico devido a tais propriedades de condução que não sofre efeito Joule e insensível a desordens não magnéticas.

3.3 O Modelo BHZ

O modelo BHZ (Bernevig, Hughes e Zhang desenvolvido em 2006^[4], a partir da descrição da estrutura de poço quântico de telureto de mercúrio (HgTe) com uma barreira de telureto de Cádmio (CdTe); permite descrever a transição de um isolante convencional para um isolante topológico através da inversão de bandas em uma dada espessura crítica d_c em que não haverá gap de energia, Figura 18. O modelo BHZ bidimensional não é somente limitado na descrição do efeito Hall Quântico de Spin para o poço quântico de HgTe, também sendo obtido semelhantemente para poços quânticos InAs/GaSb/AlSb^[84]. O modelo também não foi a primeira proposição teórica para isolantes topológicos 2D, pois no mesmo ano foi proposta a existência em filmes ultra finos de bismuto^[85], porém o estado HQS foi constatado experimentalmente pela primeira vez em poços quânticos de HgTe com CdTe, por König et al. em 2007^[5], a partir do modelo BHZ.

No modelo iremos considerar as propriedades e a rede cristalina do CdTe e HgTe, no qual

ambos possuem uma estrutura cristalina semelhante ao mineral esfalerita (blenda), estrutura *zinc-blende*, possuindo duas redes cúbicas de face centrada interpenetradas diagonalmente. A simetria de inversão \mathcal{P} é quebrada devido a essa rede cristalina, já que há um átomo distinto em cada rede cúbica, não sendo uma simetria fundamental para a formação do estado topológico HQS, que depende da inversão de bandas no poço quântico.

Para melhor compreender essa inversão, iremos analisar as bandas próximas do ponto Γ na primeira zona de Brillouin do CdTe e HgTe, Figura 28, temos bandas do tipo-s[Γ_6] e bandas do tipo-p que estão separadas devido ao acoplamento spin-órbita, com momento angular total de $J = 3/2[\Gamma_8]$ e $J = 1/2[\Gamma_7]$. Tendo a diferença de que o HgTe possui um ordenamento invertido entre as bandas tipo-s e tipo-p devido ao forte acoplamento spin-órbita, com um gap de energia negativa de $-0,3 \text{ eV}$; enquanto no CdTe o ordenamento é normal com um gap de $1,6 \text{ eV}$. A energia negativa no HgTe está relacionada com troca de bandas Γ_8 e Γ_6 associadas as massas efetivas do elétron (buraco), na banda de concavidade para cima (baixo), sendo o elétron (buraco) leve para bandas mais curvadas e pesado para bandas menos curvadas de forma que também a banda de valência Γ_8 será para buraco-pesado (*heavy-hole*) enquanto a de condução será para buraco-leve (*light-hole*), implicando em uma degenerescência em Γ para $k = 0$ de modo que o HgTe se torna um semiconductor de gap zero. Já quando em contato com a barreira de CdTe, as bandas de condução e valência no poço quântico de HgTe se dividem em sub-bandas (E_1, H_1) que em uma dada espessura crítica d_c irão inverter, possibilitando a existência do estado Hall quântico de spin^[4, 51].

Mais precisamente, as sub-bandas para o elétron Γ_6 e buraco leve Γ_8 serão dadas por E_n ($n = 1, 2, 3...$), enquanto as sub-bandas para os buracos pesados Γ_8 serão dadas por H_n . Sendo que os níveis de energias no poço quântico, Figura 29, se comportam com H_n diminuindo quando se diminui a espessura d do poço, enquanto a energia dos níveis E_n aumentam. Analisando as sub-bandas mais relevantes E_1 e H_1 , em relação ao ponto crítico $d_c \sim 6,3 \text{ nm}$, temos que para valores $d < d_c$ a energia de E_1 é maior que H_1 , enquanto que para valores $d > d_c$ maiores que o ponto crítico a energia de E_1 passará a ser menor que H_1 , devido a inversão das bandas Γ_6 e Γ_8 no *Bulk* do HgTe, sendo que no ponto crítico de espessura do poço as sub-bandas serão degeneradas.

Podemos então formular o modelo BHZ levando em conta a inversão de bandas com E_1 e H_1 sendo degenerados em d_c , implicando na simetria de reversão temporal \mathcal{T} e ao teorema de Kramers. As bases podem ser construídas por $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$, dado que $|E_1\pm\rangle$ e $|H_1\pm\rangle$, são os dois conjuntos pares de Kramers condicionados a \mathcal{T} do qual a Hamiltoniana será determinada. A simetria de paridade do problema requerem que os elementos da matriz sejam lineares para \vec{k} em primeira ordem, enquanto as simetrias de rotação requerem que os elementos a matriz tenham a forma de $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Considerando

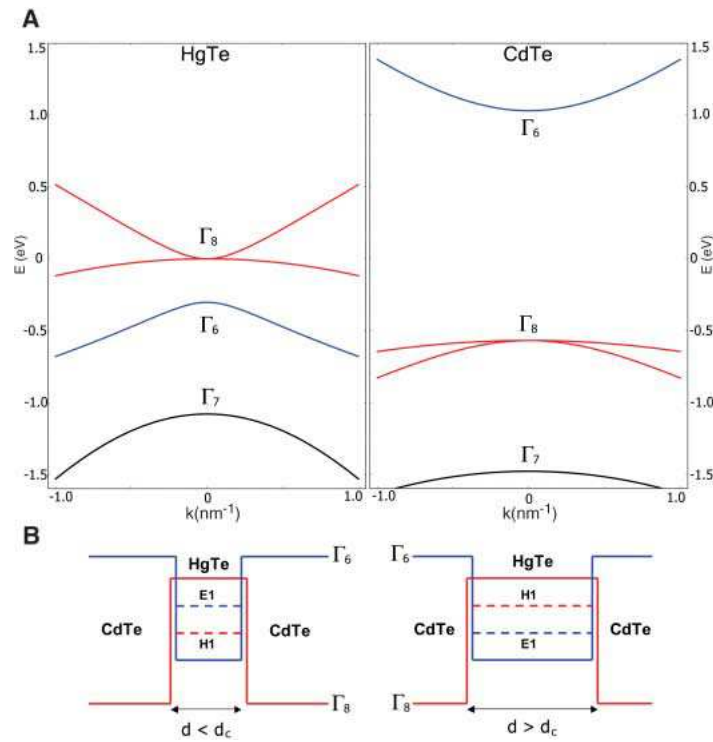


Figura 28: (a) Estrutura de bandas do *Bulk* para o CdTe e HgTe. (b) Poço quântico de HgTe com barreira de CdTe, onde temos a inversão das sub-bandas E_1 e H_1 , devido ao aumento da largura do poço quântico^[4].

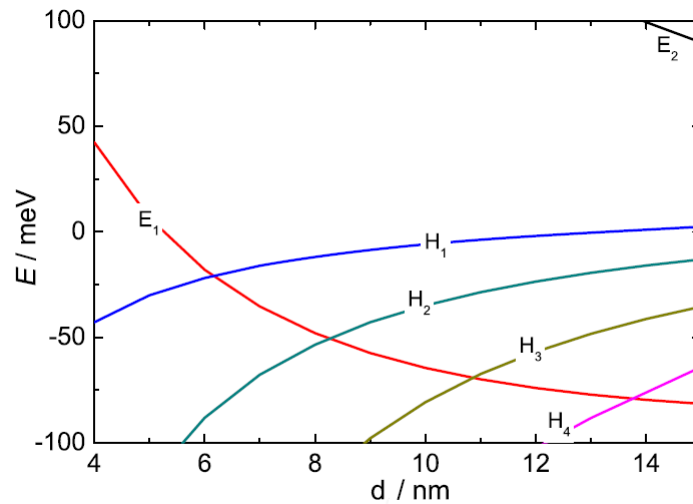


Figura 29: Níveis de energia das sub-bandas E_n e H_n em função da espessura do poço quântico d , sendo o ponto crítico $d_c \sim 6,3 \text{ nm}$ [86].

tais argumentos de simetria, a Hamiltoniana para o modelo pode então ser dada por:

$$\mathcal{H} = \epsilon(k)\mathbb{I}_{4x4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\vec{k}) & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -\mathcal{M}(\vec{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{M}(\vec{k}) & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -\mathcal{M}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (54)$$

onde $\epsilon(k) = C - D(k_x^2 + k_y^2)$ e $\mathcal{M}(\vec{k}) = M - B(k_x^2 + k_y^2)$. Sendo C um parâmetro relacionado a energia de Fermi próxima de Γ que pode ser normalizada tomando $C = 0$ sem alterar o estado topológico, o parâmetro D também não interfere no estado topológico e implica na simetria de partícula-buraco Ξ em $D = 0$, já M e B são parâmetros de massa de Dirac e Newtoniana, respectivamente. Mas em geral, A, B, C, D, M são parâmetros do material que vão depender da geometria do poço quântico.

A equação (54) é basicamente uma expansão da série de Taylor para \vec{k} , quando tomamos as bandas de condução e valência relevantes associadas a E_1 e H_1 , porém iremos reescrevê-la de outra forma para poder analisar de modo mais simples, logo:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h(\vec{k}) & 0 \\ 0 & h^*(-\vec{k}) \end{pmatrix} \quad \text{com } h(\vec{k}) = \epsilon(k)\mathbb{I}_{2x2} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\vec{k}) & A(k_x + ik_y) \\ A(k_x - ik_y) & -\mathcal{M}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (55)$$

onde podemos então ver que o modelo BHZ é uma matriz em bloco diagonal, com dois blocos relacionados entre si por simetria de reversão temporal \mathcal{T} . Assim, para análise das propriedades físicas iremos considerar o termo $h(\vec{k})$ que está relacionado ao spin *up* ($h^*(-\vec{k})$ ao spin *down*), descrevendo o chamado efeito Hall Quântico Anômalo (no qual a corrente Hall quântica de cada termo descreve uma condução independente spin polarizada) e tendo uma condutividade Hall não nula, porém devido a condutividade Hall contrária de $h^*(-\vec{k})$ e a simetria \mathcal{T} na Hamiltoniana (55), teremos uma condutividade Hall efetiva nula^[87, 88].

Em (55), o espectro de energia de $h(\vec{k})$ será $E_{\pm} = \epsilon(k) \pm \sqrt{A^2(k_x^2 + k_y^2) + \mathcal{M}^2(\vec{k})}$, e descreve a energia de dispersão próxima da espessura crítica d_c . O termo de massa $\mathcal{M}(\vec{k})$ desempenha papel fundamental na exibição do efeito HQS, e a partir dele podemos observar que se o termo de massa newtoniano $B = 0$ teremos a Hamiltoniana de Dirac massiva $(2+1)D$ para M , não diferenciando uma massa positiva de uma negativa; já quando o termo de massa de Dirac $M = 0$, a Hamiltoniana será uma de Dirac sem massa, que no ponto Γ onde as bandas se tocam o estado é degenerado, sendo usada no estudo do grafeno se considerarmos o par de blocos $h(\vec{k})$ e $h^*(-\vec{k})$, relacionados ao spin *up* e *down*. A massa de Dirac será positiva para $d < d_c$ e negativa para $d > d_c$, com $|M|$ cada vez maior quanto mais longe de d_c . Quando

$M/B < 0$, o sistema não terá uma condução hall e se comportará como um isolante trivial e quando a razão muda de sinal $M/B > 0$ ocorre uma transição de fase e o sistema associado a $h(\vec{k})$ passa a ter uma condução hall e^2/h se propagando nas bordas. Assim, quando se leva em conta $M/B > 0$, a simetria \mathcal{T} e a condutividade Hall contrária de $h^*(-\vec{k})$, teremos o efeito HQS descrito no modelo BHZ bidimensional^[51].

A descrição do modelo BHZ tridimensional leva em conta as simetrias de reversão temporal, inversão e rotação, construída considerando a estrutura romboédrica do sistema cristalino trigonal, para a família de isolantes topológicos Bi_2Te_3, Sb_2Te_3 e para baixas energias de Bi_2Se_3 . Sendo descrito por:

$$\mathcal{H} = \epsilon(k)\mathbb{I}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\vec{k}) & Ak_z & 0 & \bar{A}(k_x - ik_y) \\ Ak_z & -\mathcal{M}(\vec{k}) & \bar{A}(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & \bar{A}(k_x + ik_y) & \mathcal{M}(\vec{k}) & -Ak_z \\ \bar{A}(k_x + ik_y) & 0 & -Ak_z & -\mathcal{M}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (56)$$

onde $\epsilon(k) = C + D(k_x^2 + k_y^2) + \bar{D}k_z^2$ e $\mathcal{M}(\vec{k}) = M - B(k_x^2 + k_y^2) - \bar{B}k_z^2$. Os parâmetros $A, \bar{A}, B, \bar{B}, C, D, \bar{D}, M$ são dependentes do material e podem ser obtidas pela teoria $k.p$, ajustada à cálculos *ab initio* e resultados experimentais^[89]. Porém no modelo (56), foi feita a consideração em preservar a simetria de rotação contínua no plano, assim materiais com a simetria discreta de rotação em especial simetria de rotação tripla, permitem a inclusão de termos de terceira ordem em \vec{k} , levando à uma superfície de Fermi hexagonal, podendo produzir estados de interferência com quasi-partículas^[90]. O modelo BHZ tridimensional descreve bem as propriedades topológicas básicas para os isolantes topológicos em 3D^[51]. Semelhante ao modelo bidimensional, quando $M/\bar{B} < 0$, o sistema se comportará como um isolante trivial e quando a razão muda de sinal $M/\bar{B} > 0$ ocorre uma transição de fase e o sistema apresentará o efeito Hall Quântico de Spin.

3.4 Estados de Superfície do Isolante Topológico

Isolante Topológico Bidimensional

Um modelo efetivo para a descrição dos estados de borda do isolante topológico bidimensional pode ser obtido do modelo BHZ (Bernevig, Hughes e Zhang), equação (54), considerando os estados de borda Ψ_\uparrow e Ψ_\downarrow spin polarizados e que estão relacionados à simetria de reversão temporal, projetados na Hamiltoniana do *Bulk*, sendo $\mathcal{H}_{borda}^{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha | \mathcal{H} | \psi_\beta \rangle$ com ψ_α e ψ_β elementos de Ψ_\uparrow e Ψ_\downarrow respectivamente, de forma que^[2]:

$$\mathcal{H}_{borda} = \frac{A}{\hbar} k_y \sigma^z = v_d k_y \sigma^z = v_d \begin{pmatrix} k_y & 0 \\ 0 & -k_y \end{pmatrix}, \quad (57)$$

sendo k_y o momento dos elétrons da zona de Brillouin para um gás de elétrons bidimensional, σ^z é a matriz de Pauli, onde A é o parâmetro dependente da geometria do poço quântico necessária para produzir o efeito HQS e $A/\hbar = v_d$ representa a velocidade de Dirac, que para o caso do poço quântico de HgTe com CdTe teremos $A \simeq 3,6 \text{ eV\AA}$ e portanto $A/\hbar = v_d \simeq 5,5 \times 10^5 \text{ m/s}$ [86].

A descrição dos estados helicoidais de borda no efeito HQS, equação (57), considerando a interface com o vácuo no eixo- y na extrema borda do material, Figura 30, nos leva à um sistema com massa de Dirac nula e movimento de elétrons de spin contrários em sentidos opostos, spin *down* no sentido y positivo e spin *up* no sentido y negativo. Nessas condições, a simetria de reversão temporal \mathcal{T} é preservada e as bordas passam então a serem insensíveis a desordens não magnéticas, conduzindo uma corrente efetiva de Spin $J_s = (\hbar/2c)(J_\uparrow - J_\downarrow)$ conjuntamente associada à uma condutividade Hall nula.

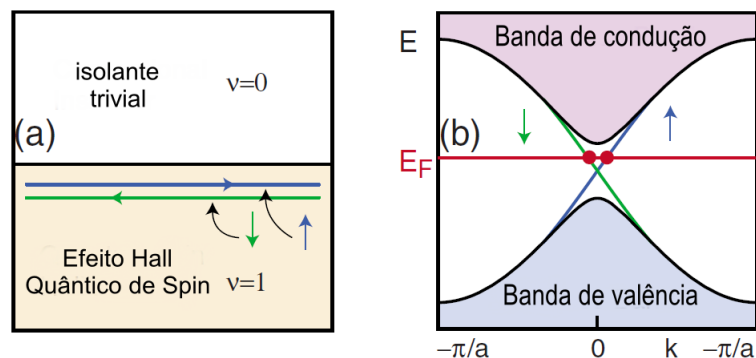


Figura 30: (a) interface isolante trivial e efeito Hall Quântico de Spin, com condução helicoidal dos elétrons nos estados de borda; (b) bandas de energia com os estados de borda conectando as bandas de valência e condução, insensíveis a desordens não magnéticas^[35].

Isolante Topológico tridimensional

Um modelo efetivo para a descrição dos estados de borda do isolante topológico tridimensional pode ser obtido do modelo BHZ 3D, equação (56), de modo semelhante ao bidimensional, porém projetando a Hamiltoniana do *Bulk* nos estados de superfície spin polarizados do isolante topológico. Considerando a interface com o vácuo, onde o invariante ν_0 muda, no plano- xy e o *Bulk* correspondendo ao eixo- z negativo, de forma que teremos^[2, 91] :

$$\mathcal{H}_{sup}(k_x, k_y) = C + \bar{A}(k_x\sigma^x + k_y\sigma^y) = C + \bar{A} \begin{pmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

sendo $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ e os parâmetros C e \bar{A} dependentes da geometria do isolante topológico. Para o caso de baixas energias de Bi_2Se_3 , tomamos $C = 0$ e $\bar{A} = 4,1 \text{ eV}\text{\AA}$ de forma que a velocidade dos estados de superfície é dada por $\bar{A}/\hbar = \nu = 6,2 \times 10^5 \text{ m/s}$. É importante frisar que a equação (58) é limitada ao caso mais simples de um único ponto de Dirac na superfície, além de considerar apenas termos lineares de primeira ordem e ignorando termos de terceira ordem para o momento eletrônico \vec{k} , que levaria ao caso de uma superfície de Fermi hexagonal.

A descrição dos estados helicoidais de superfície do isolante topológico, equação (58), pode ser reescrita para o espaço físico tomando $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}$, e iremos normalizar o parâmetro $C = 0$ relacionado a energia de Fermi próxima de Γ sem alterar o estado topológico, obtendo:

$$\mathcal{H}_{sup} = -i\hbar v \vec{\sigma}_{x,y} \cdot \vec{\nabla}_{x,y}, \quad (59)$$

onde nos permite fazer uma associação direta do spin real dos elétrons nos estados de superfície com as matrizes de Pauli $\vec{\sigma}_{x,y}$, já que quando projetamos os operadores de spin nos estados de superfície obtemos termos separados de $\langle \psi_{\uparrow} | S_i | \psi_{\downarrow} \rangle = \bar{S}_i \sigma_i$, com \bar{S}_i constante e $i = x, y, z$; sendo o modelo uma descrição efetiva por meio da Hamiltoniana de Dirac (2+1) não massiva.

A superfície do isolante topológico é isotrópica, descrita por um ponto de Dirac com a propagação dos estados de superfície helicoidal dado pela condução de spins em direções opostas na banda de condução e valência, Figura 31 (a), sem gap de energia. A simetria de reversão temporal \mathcal{T} , garante que a superfície seja invariante a perturbações não magnéticas de forma que não induz nenhuma abertura de gap de energia devido a essas impurezas e também limita a condução dos elétrons nos estados com vetores de onda opostos \vec{k} e $-\vec{k}$ a terem o sentido de spins opostos, Figura 31 (b). Sendo os estados de superfície metálicos, permite condução eletrônica em qualquer direção da superfície, desde que os spins se encontrem no plano da superfície e seu momento angular de spin seja sempre perpendicular ao momento \vec{k} . Com tal estado de superfície associado à uma fase de Berry π [2, 51].

É interessante considerar a quebra da simetria \mathcal{T} nos estados de superfície do isolante topológico, mas preservando o *Bulk*. Tal quebra de simetria produz um gap de energia, levando o isolante topológico a exibir exóticas propriedades eletromagnéticas que carregam características topológicas dos estados de superfície, como um estado Hall quântico na superfície e manifestações mensuráveis através de respostas eletromagnéticas. Tal fenômeno pode ser produzido usando campos magnéticos externos ou a proximidade de sistemas

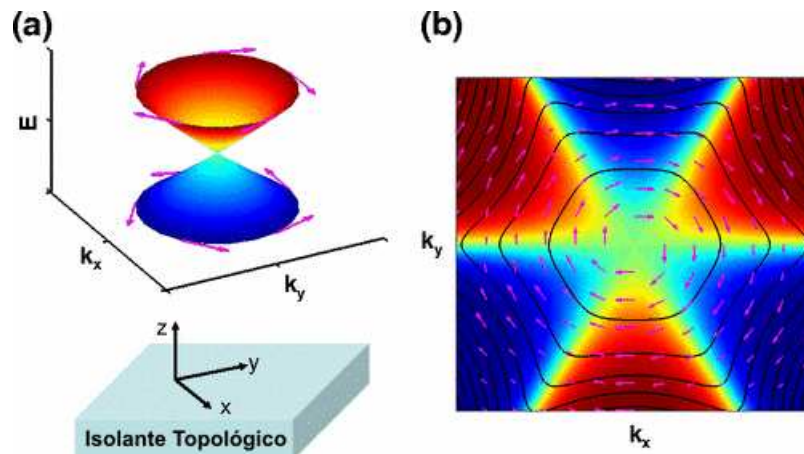


Figura 31: (a) Cone de Dirac com os spins do estado de borda próximos do ponto Γ , com helicidade dada pelos sentidos contrários para banda de condução e valência; (b) Textura de spin para os estados de superfície no espaço de momento (no eixo- z o vermelho indica spin up e azul spin $down$, com a setas correspondendo a orientação dos spins no plano- xy e as linhas pretas os contornos de mesma energia)^[92].

magnéticos, tal como um filme magnético; induzindo ao efeito magneto-elétrico topológico e introduzindo alterações no comportamento de cargas e luz ao interagirem com o isolante topológico^[35, 2].

3.5 Efeito Magneto-elétrico Topológico

A preservação da simetria de reversão temporal \mathcal{T} no *Bulk* do isolante topológico e a sua quebra na superfície abrindo um gap de energia, induz uma resposta eletromagnética não usual quando induzimos um campo magnético ou um campo elétrico externo, de modo que teremos uma indução conjunta de polarização e magnetização no material, algo que não acontece com um isolante trivial já que nesse caso um campo magnético induzirá uma polarização elétrica e um campo elétrico induzirá uma magnetização. Tal resposta não usual está atrelada à uma corrente do efeito hall quântico advinda da fase topológica dos estados de superfície que é gerada com a quebra de simetria \mathcal{T} . Tal resposta eletromagnética é chamada de efeito magneto-elétrico topológico^[2, 58, 93, 94], sendo quantizada em termos da constante de estrutura fina $\alpha = e^2/\hbar c$ ^[35, 95].

O efeito magneto-elétrico topológico pode ser descrito pela teoria de campos de eletrodinâmica axial^[96], por uma descrição topológica do tipo Chern-Simons^[58, 94, 95]. Consistindo basicamente do termo lagrangiano dado pelo modelo de Maxwell usual \mathcal{L}_0 , acrescido do termo topológico \mathcal{L}_θ que possui a mesma estrutura para a descrição da dinâmica das partículas áxion^[97], sendo descrito então através de uma lagrangiana efetiva dada por:

$$\mathcal{L}_{ef} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_\theta = \frac{1}{8\pi} \mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} - \frac{1}{c} \mathcal{A}_\mu \mathcal{J}^\mu + \frac{\alpha\theta}{16\pi^2} \mathcal{F}^{\mu\nu} \tilde{\mathcal{F}}_{\mu\nu}, \quad (60)$$

sendo o campo θ uma variável dinâmica que assume valores distintos na teoria axial, $\mathcal{A}_\mu = (\phi, \vec{A})$ o quadrivetor dos campos potenciais escalar ϕ e vetorial \vec{A} , $\mathcal{J}^\mu = (\rho, \vec{J})$ o quadrivetor da densidade de cargas ρ e corrente \vec{J} , $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ o tensor eletromagnético e $\tilde{\mathcal{F}}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \mathcal{F}_{\alpha\beta}$ o tensor eletromagnético dual a $\mathcal{F}_{\mu\nu}$, com ϵ o símbolo de Levi-Civita.

Diferentemente da teoria axial no qual o campo θ é uma variável dinâmica, no isolante topológico ela será restrita, associada as duas classes possíveis que são desconectadas entre si, mas podendo ser conectadas continuamente por perturbações que quebrem a simetria de reversão temporal^[58, 93], sendo:

$$\begin{cases} \theta = \pm\pi & \text{para isolantes topológicos} \\ \theta = 0 & \text{para isolantes triviais} \end{cases}, \quad (61)$$

em que quando temos a quebra da simetria \mathcal{T} , produzindo um gap de energia e uma variação no campo θ com o isolante trivial, teremos o surgimento da corrente de efeito hall quântico induzida dessa quebra, podendo ser escrita em termos do campo θ :

$$\sigma_{xy} = \frac{\theta}{\pi} \frac{e^2}{2h}, \quad (62)$$

sendo uma condutividade Hall semi-inteira, devido ao isolante topológico ter um *winding number* $w = \pm 1/2$, devido a quebra da simetria, diferentemente de $w = \pm 1$ no efeito hall quântico usual.

A ação efetiva da equação (60) é dada por, $S_{ef} = \int \mathcal{L}_{ef} d^4x$, sendo d^4x o elemento de volume em (3+1)D, podendo ser reescrita de forma vetorial em termo dos campos \vec{E} e \vec{B} ^[51] :

$$S_{ef} = \int \left[\frac{\alpha\theta}{4\pi^2} \vec{E} \cdot \vec{B} + \frac{1}{8\pi\alpha} \left(\epsilon E^2 + \frac{1}{\mu} B^2 \right) \right] d^3x dt, \quad (63)$$

com ϵ e μ a permissividade elétrica e permeabilidade magnética respectivamente. Através das propriedades eletromagnéticas da ação, teremos que o termo topológico $\mathcal{L}_\theta = (\theta\alpha/4\pi^2) \vec{E} \cdot \vec{B}$ não altera a estrutura das equações de Maxwell usuais^[96], porém implica em alterações nas relações constitutivas dos campos, devido ao valor assumido pelo campo $\theta = \pm\pi$ para um isolante topológico, de modo que:

$$\begin{cases} \vec{H} = \vec{B} - 4\pi\vec{M} + \frac{\theta\alpha}{\pi} \vec{E} \\ \vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} - \frac{\theta\alpha}{\pi} \vec{B} \end{cases}, \quad (64)$$

com \vec{M} e \vec{P} a magnetização e polarização respectivamente. Podemos também definir uma polarização eletromagnética em (64) dada por $P_{EB} = \theta/2\pi = \pm 1/2$, no qual a direção da superfície magnetizada determina o sinal de polarização, positivo apontando para fora da superfície e negativo para dentro^[58].

Da equação (64), vemos que a polarização de uma carga acrescenta uma contribuição proporcional a $\theta\vec{B}$ e a magnetização acrescenta uma contribuição proporcional a $\theta\vec{E}$, de forma que θ/π será nosso coeficiente magneto-elétrico cuja resposta de contribuição é quantizada em função da constante de estrutura fina para $\pm\theta\alpha/\pi = \pm 2\alpha(n + 1/2)$, com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$; Sendo tal resposta a campos externos, a característica fundamental do efeito magneto-elétrico topológico.

Considere o exemplo de um isolante topológico cilíndrico, cuja simetria de reversão temporal na superfície é quebrada por um filme fino magnético na área lateral, cuja magnetização é perpendicular a superfície. Quando aplicamos um campo elétrico \vec{E} externo que seja paralelo a superfície lateral, Figura 32 (a), o sistema irá exibir uma resposta eletromagnética que corresponde à uma corrente Hall quantizada dada por^[58] :

$$\vec{J}_{Hall} = \frac{\theta}{\pi} \frac{\alpha c}{4\pi} (\hat{n} \times \vec{E}) = \frac{\theta}{\pi} \frac{e^2}{2h} (\hat{n} \times \vec{E}) = \pm \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h} (\hat{n} \times \vec{E}), \quad (65)$$

em que \hat{n} é o vetor unitário normal a superfície, e cujo valores do campo $\theta = \pm\pi$ correspondendo a direção de magnetização da superfície. \vec{J}_{Hall} por sua vez, está associada diretamente com uma magnetização gerada proporcional ao campo elétrico aplicado:

$$\vec{M}_t = -\frac{\theta}{\pi} \frac{\alpha}{4\pi} \vec{E} = -\frac{\theta}{\pi} \frac{e^2}{2hc} \vec{E} = \mp \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{hc} \vec{E}, \quad (66)$$

sendo essa magnetização a resposta topológica magneto-elétrica ao campo \vec{E} externo. De modo complementar, quando aplicamos um campo magnético \vec{B} externo que seja paralelo a superfície lateral, Figura 32 (b), o sistema irá exibir uma resposta eletromagnética que corresponde à um acúmulo de cargas ρ_{Hall} , cuja variação no tempo considerando a equação de continuidade para conservação de cargas, é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{Hall}}{\partial t} &= -\frac{\theta}{\pi} \frac{\alpha c}{4\pi} \left[\vec{\nabla} \cdot (\hat{n} \times \vec{E}_{\circ}) \right] = -\frac{\theta}{\pi} \frac{e^2}{2h} \left[\vec{\nabla} \cdot (\hat{n} \times \vec{E}_{\circ}) \right] \\ &= \mp \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h} \left[\vec{\nabla} \cdot (\hat{n} \times \vec{E}_{\circ}) \right], \end{aligned} \quad (67)$$

em que tal densidade de cargas é gerada quando o campo magnético é iniciado em zero até \vec{B} , que pela lei de Faraday irá induzir um campo elétrico \vec{E}_{\circ} paralelo a superfície lateral do cilindro implicando em uma corrente Hall contrária ao sentido de \vec{B} , levando ao acúmulo

de cargas nas extremidades superior e inferior. Em que ρ_{Hall} por sua vez, está associado diretamente com uma polarização elétrica gerada proporcional ao campo magnético aplicado:

$$\vec{P}_t = \frac{\theta}{\pi} \frac{\alpha}{4\pi} \vec{B} = \frac{\theta}{\pi} \frac{e^2}{2hc} \vec{B} = \pm \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{hc} \vec{B}, \quad (68)$$

sendo essa polarização elétrica a resposta topológica magneto-elétrica ao campo \vec{B} externo.

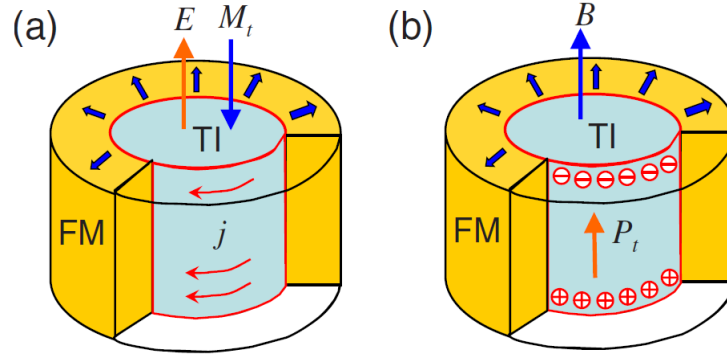


Figura 32: Isolante topológico cilíndrico coberto por filme fino magnético na área lateral, de magnetização perpendicular a superfície. (a) a aplicação de um campo elétrico \vec{E} externo induz uma resposta topológica magneto-elétrica de magnetização \vec{M}_t ; (b) a aplicação de um campo magnético externo variável induz uma resposta topológica magneto-elétrica de polarização elétrica \vec{P}_t [58].

O campo \vec{E} induzir a corrente \vec{J}_{Hall} equivalente a magnetização topológica \vec{M}_t e o campo \vec{B} variável induzir o acúmulo de cargas ρ_{Hall} equivalente a polarização topológica \vec{P}_t , é comum a todos os casos de geometrias para isolantes topológicos. Porém a configuração da condução Hall \vec{J}_{Hall} irá depender da geometria da superfície, de modo que sua magnetização \vec{M}_t pode ter características especiais.

Apesar de outros materiais poderem apresentar efeitos magneto-elétricos, o efeito magneto-elétrico topológico é uma ferramenta que pode ser utilizada para determinar se um material é isolante topológico, já que tal efeito é exclusivo para tais materiais quando se leva em consideração a resposta da contribuição magneto-elétrica quantizada em função da constante de estrutura fina $\alpha(n + 1/2)$. É importante saber também que a teoria de campos de eletrodinâmica axial em (60) para tal efeito, não é exata para todos os casos, sendo válida somente nos limites de baixas energias (longos comprimentos de onda)^[68].

Monopolo Magnético Induzido por Carga Imagem

Uma consequência direta do efeito magneto-elétrico topológico é o efeito imagem de monopolo magnético^[93], consistindo em um monopolo magnético induzido por uma carga

imagem gerada por uma carga de prova próxima da superfície de um isolante topológico com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície. Tal par de carga imagem e monopolo induzido está diretamente associado com o campo elétrico gerado pela carga prova de modo que devido o efeito magneto-elétrico topológico o campo na superfície produz um campo magnético que se comporta identicamente a um monopolo magnético no interior do isolante topológico.

Considere o caso de um isolante topológico localizado no eixo- z negativo, cuja superfície se encontra no plano- xy em $z = 0$, com a quebra de simetria \mathcal{T} em $(x, y, 0)$, Figura 33 (imagem à esquerda), fazendo uma interface com um isolante trivial localizado no eixo- z positivo que possui uma carga q de prova (pontual) colocada em seu *Bulk* à uma distância d do plano em $(0, 0, d)$. O campo elétrico produzido por essa carga q localizada em $(0, 0, d)$, induz uma corrente \vec{J}_\odot circulante na superfície do isolante topológico, que pelo efeito magneto-elétrico se associa a um campo magnético gerado cujas linhas de campo podem ser associadas a um monopolo magnético imagem.

O método das imagens permite determinar as configurações de campo elétrico e magnético no problema proposto, através da solução de uma carga elétrica q_1 imagem localizada dentro do *Bulk* do isolante topológico à uma distância d do plano em $(0, 0, -d)$, e um monopolo magnético g_1 imagem na mesma posição em $(0, 0, -d)$. Assim, pelo método das imagens e usando as relações constitutivas da equação de Maxwell em (64), considerando as condições de contorno do problema na interface ($z = 0$) e o campo $\theta = 0$ para o isolante trivial em ($z > 0$) e $\theta = \theta_0 = (2n + 1)\pi$ para o isolante topológico em ($z < 0$), obtemos^[93] :

$$q_1 = \frac{1}{\epsilon_1} \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) - \alpha^2 \theta_0^2 / \pi^2}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2 \theta_0^2 / \pi^2} q, \quad (69)$$

sendo a permissividade elétrica (ϵ_1, ϵ_2) e permeabilidade magnética (μ_1, μ_2) correspondendo ao isolante trivial (*em* $z > 0$) e do isolante topológico (*em* $z < 0$), respectivamente. Assim, o campo elétrico é dado pela carga efetiva q/ϵ_1 em $(0, 0, d)$ e pela carga imagem q_1 em $(0, 0, -d)$. Já o monopolo magnético será^[93] :

$$g_1 = \frac{2\alpha\theta_0/\pi}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2 \theta_0^2 / \pi^2} q, \quad (70)$$

de modo que o campo magnético gerado pela corrente \vec{J}_\odot circulante na interface ($z = 0$), seja descrito pelo monopolo magnético em $(0, 0, -d)$. A solução da carga de prova q , mais as cargas imagem q_1 e g_1 , permite descrever as configurações do campo eletromagnético para a região ($z > 0$); Porém de modo semelhante para um observador no isolante topológico na região ($z < 0$), terá uma configuração de campo eletromagnético descrito por cargas imagem q_2 e g_2 , localizadas conjuntamente no ponto $(0, 0, d)$ do *Bulk* do isolante trivial, sendo $q_2 = q_1$ e $g_2 = -g_1$.

Uma carga de prova próxima de um isolante trivial naturalmente apresenta uma carga imagem devido a polarização de cargas no interior do isolante, de forma que alguns tipos de isolantes que apresentam alguma superfície hall ou conduções equivalentes, ou mesmo um *Bulk* com efeito magneto-elétrico (não topológico) podem apresentar efeitos similares aos que foram descritos para carga imagem de monopolo, tal como isolantes multiferróicos ou que possuam estados hall quântico em superfície^[51, 98].

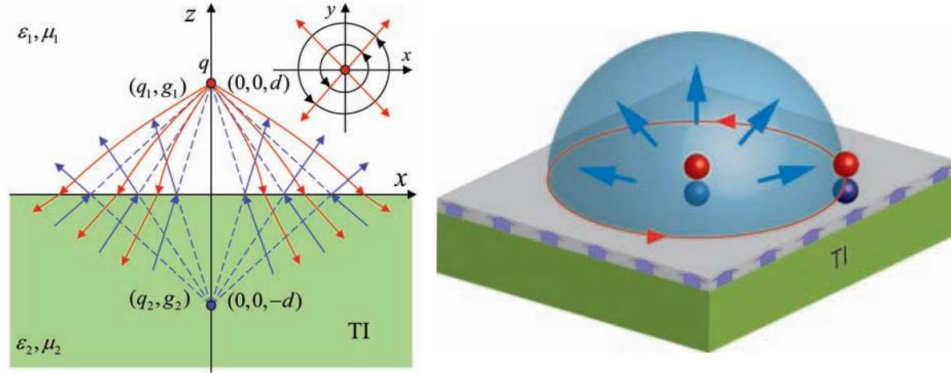


Figura 33: Carga imagem e monopolo induzidos no isolante topológico com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície, devido ao campo elétrico de uma carga q de prova (pontual), sendo vermelho as linhas de campo elétrico, azul do magnético e preto sendo \vec{J}_S no plano- xy (imagem à esquerda); Sistema de dyon com estatística fracionária induzida pelo efeito imagem de monopolo magnético (imagem à direita)^[93].

O par constituído da carga elétrica q_1 e do monopolo magnético g_1 localizados em $(0, 0, -d)$, pode ser definido em um sistema de dyon discutido em física de altas energias, Figura 33 (imagem à direita), através de uma estatística fracionária^[99]. Considere o caso de duas cargas à uma distância d do isolante topológico com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície e uma distancia R entre cada carga, quando consideramos um caso dinâmico em que as cargas se movem, teremos também um movimento das cargas imagem e dos monopolos induzidos de modo que formam um estado acoplado entre si, o sistema de dyon, com cada carga sentido um fluxo magnético gerado pelo monopolo induzido pela outra. No caso em que a distância R entre as cargas for muito maior que d , o fluxo entre elas será $\sim g/2$, de modo que a fase Aharonov-Bohm do campo magnético entre as duas, associado ao ângulo estatístico de interação, será^[93] :

$$\varphi = \frac{g_1 q}{2hc} = \frac{\alpha^2 \theta_0 / \pi}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2 \theta_0^2 / \pi^2}, \quad (71)$$

no qual consideramos que as cargas são elétrons $q = e$, sendo que tal estatística de dyon é definida com o elétron se movendo colado a superfície do isolante topológico $d \sim 0$, de

modo que o dyon sempre permanece confinado a superfície bidimensional. Considerando o mesmo caso de duas cargas q_a e q_b , é possível medir o monopolo imagem caso uma das cargas seja sensível a baixos campos magnéticos; usando técnicas experimentais como microscopia de força magnética (MFM) ou sensor de fluxo magnético “*Superconducting Quantum Interference Device*” (SQUID)^[51, 93].

Efeito Witten

Pelas equações de Maxwell para o eletromagnetismo, notamos que não existe uma simetria de cargas devido a ausência de cargas magnéticas. Apesar da possibilidade de cargas magnéticas existirem ter sido proposta por Pierre Curie em 1894^[100], e sua possível existência explicando o motivo das cargas elétricas se manifestarem em múltiplos inteiros de carga elementar ter sido proposta por Paul Dirac em 1931^[101], até hoje nunca se observou a sua existência na natureza. Por isso é importante compreender que o monopolo magnético induzido pela carga imagem tratado no problema anterior é artificial, não sendo um monopolo magnético real, nem uma excitação elementar do sistema, nem uma quase-partícula emergente de comportamentos coletivos no sistema; sendo somente uma descrição em matéria condensada para os efeitos físicos gerados no sistema devido ao comportamento magneto-elétrico topológico.

Porém seria interessante considerar a possível existência de um monopolo magnético real e sua relação com o efeito magneto-elétrico topológico. Caso existisse um monopolo magnético no interior de um isolante topológico com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície, teríamos uma polarização de cargas gerada pela configuração de campo magnético existente, sendo esse efeito associado em física de altas energias como efeito Witten^[99].

Dentro do isolante topológico, o monopolo magnético q_m irá se comportar como um dyon, com um estado ligado à uma carga elétrica q_e dada por^[58] :

$$q_e = e \frac{\theta}{2\pi} \frac{q_m}{\phi_0} = e^2 \frac{\theta}{2\pi} \frac{q_m}{hc}, \quad (72)$$

em que ϕ_0 é o quanta de fluxo magnético. Aqui podemos notar uma diferença para esse efeito, no qual o monopolo apresenta uma carga elétrica devido ao campo θ nas relações constitutivas da equação de Maxwell em (64), mas a carga elétrica não possui um termo de quanta de fluxo elétrico, evidenciando a ausência de uma simetria entre o campo magnético e elétrico. O efeito Witten associado a esse comportamento de dyon pode ser analisado considerando o movimento do monopolo no interior do isolante topológico, no qual a carga polarizada irá aumentar gradualmente estando atrelada ao quanta de fluxo magnético, o que leva a um bombeamento de cargas elétricas de proximidades de dentro do sistema até a

localização do monopolo magnético^[102].

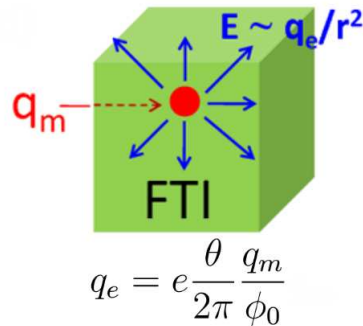


Figura 34: Efeito Witten apresentando uma carga de prova q_m de monopolo magnético no interior de um isolante topológico ferromagnético com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície, apresentando uma carga elétrica imagem que se comporta com decaimento usual de $1/r^2$ [103].

A inexistência de monopolos magnéticos reais inviabiliza a verificação do efeito Witten, que da forma proposta permitiria a detecção experimental de monopolos reais usando isolantes topológicos com quebra de simetria \mathcal{T} na superfície^[104]. Porém existem propostas para o efeito Witten considerando monopolos efetivos como excitação elementar, como no caso proposto em 2009 por B. Seradjeh et al^[105]; no qual consideraram a interação Coulomb entre elétrons de duas superfícies de um isolante topológico, cuja interação leva a um tipo de "condensado de excitons" nos estados de superfície com um tunelamento entre a superfície inferior e superior associado à uma fase $e^{i\phi}$. Tal acoplamento se comporta no isolante topológico da mesma forma que um campo eletromagnético, de modo que quando a fase apresenta um estado de vórtice, ele se torna equivalente a um monopolo magnético que carrega uma carga semi-inteira e com isso apresentando também uma carga elétrica imagem semi-inteira devido ao efeito Witten^[51].

3.6 Efeito Kerr Topológico e Rotação de Faraday

Uma outra interessante consequência do efeito magneto-elétrico topológico é a interação da superfície do isolante topológico com a luz, no qual um feixe de luz linearmente polarizado tem seu plano de polarização rotacionado quando é refletido (efeito Kerr) ou transmitido (efeito Faraday) na interface da superfície^[95, 58].

Para exemplificar tais casos, considere uma interface semelhante ao problema do efeito imagem de monopolo magnético, no qual temos um isolante topológico localizado no eixo- z negativo, cuja superfície se encontra no plano- xy em $z = 0$, com a quebra de simetria \mathcal{T} em $(x, y, 0)$, Figura 35 (imagem à esquerda), fazendo uma interface com um isolante trivial

localizado no eixo- z positivo. Como a luz é descrita pelo eletromagnetismo de Maxwell, como propagação de campos eletromagnéticos na ausência de cargas, devemos então esperar que exista uma resposta eletromagnética devido a influência do efeito magneto-elétrico topológico na interação de superfície.

Rotação de Faraday: Consiste na mudança do ângulo de polarização da luz transmitida, de um feixe de luz incidente com polarização linear, Figura 35 (imagem à esquerda). Considerando o efeito magneto-elétrico, temos que o campo elétrico da luz polarizada irá gerar uma componente de campo magnético $\propto \theta \vec{B}_t$ na mesma direção, enquanto o campo magnético irá gerar uma componente de campo elétrico $\propto \theta \vec{E}_t$ em sua direção, de forma que devido aos campos incidentes serem mutuamente perpendiculares enquanto os campos gerados serem componentes ortogonais dos campos da luz transmitida, temos que o efeito final resultante seja uma rotação de θ_F no plano de polarização da luz transmitida em relação a incidente. Resolvendo as relações constitutivas da equação de Maxwell em (64) para a onda eletromagnética incidente, teremos que o ângulo de rotação de Faraday para a luz transmitida é dado por^[58, 95] :

$$\tan \theta_F = \frac{\alpha \theta_0 / \pi}{\sqrt{\epsilon_1 / \mu_1} + \sqrt{\epsilon_2 / \mu_2}} = \frac{2\alpha P_{EB}}{\sqrt{\epsilon_1 / \mu_1} + \sqrt{\epsilon_2 / \mu_2}}, \quad (73)$$

sendo a permissividade elétrica (ϵ_1, ϵ_2) e permeabilidade magnética (μ_1, μ_2) correspondendo ao isolante trivial ($em z > 0$) e do isolante topológico ($em z < 0$), respectivamente. Como o *Bulk* do isolante topológico permanece invariante a \mathcal{T} , teremos que a luz irá se propagar em seu interior sem outra rotação adicional até chegar a superfície oposta ou ser absorvida pelo meio.

Efeito Kerr Topológico: Consiste na mudança do ângulo de polarização da luz refletida, de um feixe de luz incidente com polarização linear, Figura 35 (imagem à direita). Os argumentos para sua manifestação são semelhantes ao efeito Faraday, de forma que resolvendo as relações constitutivas da equação de Maxwell em (64) para a onda eletromagnética incidente, teremos que o ângulo de rotação de Kerr θ_K para a luz refletida é dado por^[58, 95] :

$$\tan \theta_K = \frac{2\alpha \theta_0 / \pi \sqrt{\epsilon_1 / \mu_1}}{\epsilon_2 / \mu_2 - \epsilon_1 / \mu_1 + \alpha^2 \theta_0^2 / \pi^2} = \frac{4\alpha P_{EB} \sqrt{\epsilon_1 / \mu_1}}{\epsilon_2 / \mu_2 - \epsilon_1 / \mu_1 + 4\alpha^2 P_{EB}^2}. \quad (74)$$

Devido a dependência dos parâmetros de permissividade elétrica e permeabilidade magnética dos materiais, não é possível medir diretamente o campo θ para poder saber as propriedades topológicas do material, tal como sua condutividade Hall semi-inteira. Porém é possível cancelar a dependência desses parâmetros se levar em consideração a superfície superior e inferior do isolante topológico para a luz transmitida e refletida^[106, 107]. Considere um sistema com um campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$ em que temos a interface de um isolante

topológico em $(z = [-l, 0])$ com o vácuo em $(z > 0)$ e um substrato em $(z < -l)$, Figura 35 (imagem à direita), de forma que quando incidimos uma onda eletromagnética linearmente polarizada de campo elétrico E_{in} , a sua luz transmitida E_t associada a rotação de Faraday θ_F e sua luz refletida E_r , associada a rotação de Kerr θ_K atravessam a superfície superior e inferior do isolante topológico. Medindo os ângulos θ_F e θ_K para duas frequências especiais de refletividade (máxima e mínima) é possível ter informação suficiente para cancelar a dependência dos parâmetros ϵ e μ e com isso determinar o campo θ . Dessa forma, a rotação de Faraday e Kerr permitem medir o campo θ do material, dando acesso as propriedades topológicas do *bulk* para determinar indiretamente condutividade Hall semi-inteira^[106].

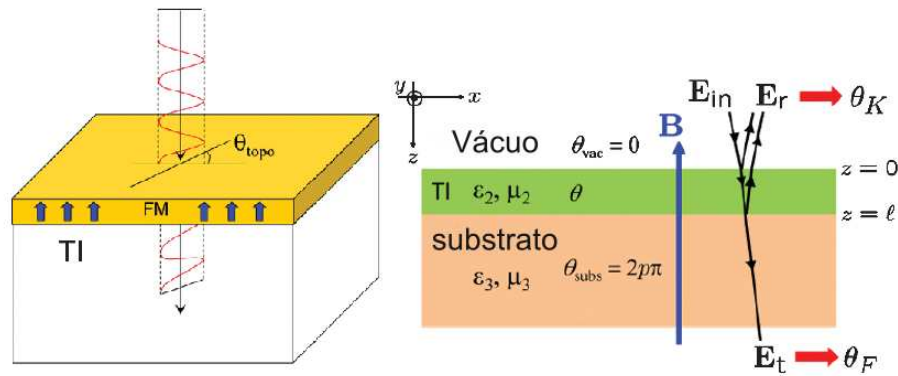


Figura 35: Rotação θ_{topo} no plano de polarização da luz transmitida do efeito Faraday na superfície de um isolante topológico revestido com um filme fino magnético (imagem à esquerda); (imagem à direita)^[2, 58, 106].

A resposta eletromagnética topológica dos efeitos Faraday e Kerr são de baixa magnitude, como podemos ver em (73) e (74) a sua contribuição no ângulo de rotação da polarização é da ordem da constante de estrutura fina $\alpha \sim 1/137$. Como existem outros efeitos eletromagnéticos não topológicos e que cujo efeitos são maiores que o topológico, tais efeitos topológicos acabam por serem difíceis de serem detectados, tanto que apesar da formulação do efeito magneto-elétrico topológico em 2008^[58], somente em 2015^[108] teve a detecção experimental para a rotação de Faraday. Como já foi dito, tal teoria é válida somente nos limites de baixas energias (longos comprimentos de onda) de forma que os efeitos Faraday e Kerr podem ser apenas observados para fótons com frequência $\hbar\omega \ll E_g$, sendo E_g a energia de gap do isolante topológico.

Outras manifestações do efeito magneto-elétrico topológico podem ser consideradas levando em conta os casos dinâmicos, em que a mudança de ângulo θ através da superfície não seja fixa ou em que temos um filme fino magnético cujo momento magnético seja dinâmico. No caso do filme fino, uma mudança na direção do momento magnético modificaria a condução

hall na superfície de modo dinâmico e no caso de paredes de domínio magnéticas, poderia existir conduções quirais presas entre essas configurações, levando a situações complexas de densidade e condução de cargas; tendo vários estudos propostos considerando tais casos^[109, 110, 111, 112, 113, 114]. Tais condições permitem em alguns casos poder considerar a possibilidade de controle do momento magnético na superfície do isolante topológico utilizando correntes que modificam a densidade e condução de cargas atreladas ao filme fino pelo efeito magneto-elétrico topológico^[110, 111, 112].

4 Soluções Magnéticas Acopladas a Superfície de Isolantes Topológicos

4.1 Ferromagneto

O primeiro caso de interação que será analisado são os efeitos gerados devido a presença de um ferromagneto acoplado na superfície de um isolante topológico tridimensional, Figura 36, no qual será considerado a Hamiltoniana de superfície (58) acrescida da interação $\sum_{i=x,y,z} m_i \sigma^i$ (unidades naturais), com \vec{m} o momento magnético ferromagnético. Portanto, para um ferromagneto, a Hamiltoniana de superfície acoplada a magnetização é^[2] :

$$\mathcal{H}_F = \begin{pmatrix} m_z & k_x + m_x - i(k_y + m_y) \\ k_x + m_x + i(k_y + m_y) & -m_z \end{pmatrix}, \quad (75)$$

sendo os autovalores da Hamiltoniana da equação (75) diretamente obtida a partir diagonalização da matriz bidimensional, $\mathcal{H} = E\mathbb{I}_2$, portanto:

$$E(k) = \pm \sqrt{(k_x + m_x)^2 + (k_y + m_y)^2 + m_z}. \quad (76)$$

Podemos concluir a partir da configuração de energia (76) que as componentes de momento magnético ferromagnético paralelas a superfície do isolante topológico apenas produzem um deslocamento da superfície de Fermi proporcional a $(-m_x, -m_y)$, preservando a simetria \mathcal{T} e mantendo as mesmas propriedades do cone de Dirac na superfície do isolante topológico. Entretanto, o termo de perturbação $m_z \sigma^z$ associado a componente perpendicular a superfície do isolante topológico, desestabiliza os estados de superfície abrindo um gap de energia proporcional a $2|m_z|$, violando a simetria \mathcal{T} .

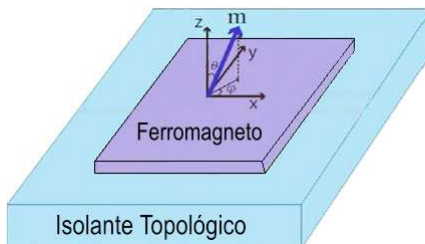


Figura 36: Ilustração de um filme fino ferromagneto com momento $\vec{m}(m_x, m_y, m_z)$, acoplado na superfície de um isolante topológico^[51].

O caso em que $m_z \neq 0$, se mostra interessante devido a diferentemente de um isolante topológico bidimensional, induzir um estado de condução quiral no isolante topológico,

levando à uma condutividade Hall semi-inteira dada por^[2] :

$$\sigma_{xy} = \frac{m_z}{|m_z|} \frac{e^2}{2h}, \quad (77)$$

no qual pode ser compreendida devido ao vetor $\vec{d}(k) = (k_x, k_y, m_z)$ associado a Hamiltoniana de superfície $\mathcal{H}(k) = k_x\sigma_x + k_y\sigma_y + m_z\sigma_z$, cobrir uma semi-esfera e levando a um *winding number* $w = \pm 1/2$, com a condição de que em $\vec{k} = 0 \Rightarrow \vec{d}(k) = (0, 0, m_z/|m_z|)$.

A condutividade Hall semi-inteira (77), diferentemente da condutividade Hall inteira, não pode ser experimentalmente medida através de uma corrente direta, mas pode ser indiretamente medida por efeitos tal como a rotação de Faraday e Kerr. Para um sistema Hall quântico bidimensional os estados de borda que transportam a corrente Hall estão conectados aos condutores na medição da corrente, entretanto no isolante topológico devido a sua estrutura tridimensional, a superfície que o envolve é inteiramente fechada e portanto sem bordas, de forma que se for aberto um gap de energia na superfície não haverá estados de borda para que se possa propagar uma corrente direta. Tal condição permite levar a um interessante caso de condutividade que permite uma medição experimental, se uma parede de domínio magnética for acoplada na superfície do isolante topológico, Figura 37 (a), então terá um salto na condutividade Hall (77), de forma que terá uma condutividade final efetiva de e^2/h nos estados quirais de borda gerados na parede de domínio^[7]. Outro fenômeno interessante devido a interface do isolante topológico com ferromagneto é a conversão de corrente de spin-para-carga, tendo sido experimentalmente observada em Bi_2Se_3 e liga de $(Bi_{0.22}Sb_{0.78})_2Te_3$ ^[115, 116].

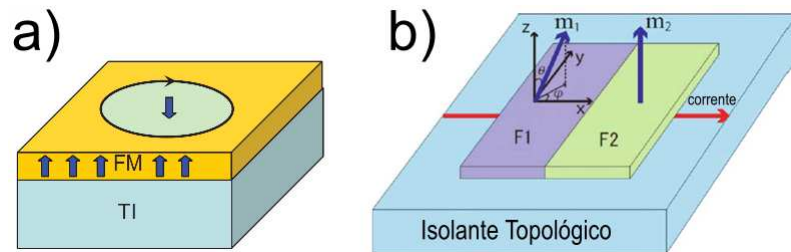


Figura 37: Ferromagnetos acoplados a superfície de um isolante topológico. (a) com uma parede de domínio devido a magnetizações opostas, gerando uma condução quiral nos estados de borda; (b) transporte de corrente na interface entre ferromagnetos $F1(\vec{m}_1)$ e $F2(\vec{m}_2)$ [2, 51, 109].

Vamos analisar como se comporta uma condução de corrente na superfície de um isolante topológico entre a interface da junção de dois ferromagnetos bidimensionais acoplados a essa superfície, Figura 37 (b), no qual a magnetização do primeiro ferromagneto $F1$ a esquerda é

$\vec{m}_1 = (m_x, m_y, m_z) = m_1(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ e a magnetização do ferromagneto $F2$ a direita é $\vec{m}_2 = m_2(0, 0, 1)$, sendo a região de interface no eixo- y para $x = 0$. Devido a incompatibilidade direta na interface entre os dois ferromagnetos, será formada uma pequena barreira ao qual poderemos desconsiderar na análise de condução na barreira já que pretendemos encontrar uma condução de tunelamento na região de interface, portanto as funções de onda da região esquerda ($F1$) e direita ($F2$) são^[51, 109] :

$$\begin{aligned} \psi(x \leq 0) &= \frac{1}{\sqrt{2E(E - m_z)}} e^{i(k_x + m_x)x} \begin{pmatrix} k_x + m_x - i(k_y + m_y) \\ E - m_z \end{pmatrix} \\ &+ \frac{r}{\sqrt{2E(E - m_z)}} e^{-i(k_x + m_x)x} \begin{pmatrix} -k_x - m_x - i(k_y + m_y) \\ E - m_z \end{pmatrix}, \\ \psi(x \geq 0) &= \frac{t}{\sqrt{2E'(E' - m_2)}} e^{ik'_x x} \begin{pmatrix} k'_x - ik_y \\ E' - m_2 \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (78)$$

sendo r e t os coeficientes de reflexão e transmissão respectivamente e

$$E = \pm \sqrt{(k_x + m_x)^2 + (k_y + m_y)^2 + m_z^2} = \pm \sqrt{k_x'^2 + k_y^2 + m_2^2} + V, \quad (79)$$

com \pm correspondendo a banda superior e inferior e $E' = E - V$ para V correspondendo a diferença entre a energia de Fermi nos dois ferromagnetos. Temos que combinando as funções de onda (78) na interface ($x = 0$), o coeficiente de transmissão será^[51, 109] :

$$t = \frac{2(k_x + m_x)}{[k_x + m_x + i(k_x + m_y)] \sqrt{\frac{E' - m_2}{E - m_z}} + (k'_x - ik_y) \sqrt{\frac{E - m_z}{E' - m_2}}}, \quad (80)$$

e com isso podemos definir a solução normalizada da condutividade de tunelamento:

$$\sigma_T = \frac{1}{2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\phi |t|^2 \text{Re} \left[\frac{k'_x}{E} \right]. \quad (81)$$

Para analisar a condutividade de tunelamento, iremos chamar de n/p o nível de Fermi que cruza a banda superior/inferior e então vamos considerar quatro casos de condução, Figura 38, no qual em todos iremos tomar $m_1 = \sqrt{0,9}E$. No mapa de condutância que depende dos ângulos polares da magnetização de $F1$, os tons em vermelho representam maior condutância enquanto os em azul representam baixa condutância, no qual nas figuras em (a) e (c) são desconsiderados os efeitos do segundo ferromagneto, enquanto em (b) e (d) temos uma magnetização $m_2 = \sqrt{0,9}E$. As oscilações no ângulo ϕ estão relacionadas a mudança no nível de Fermi entre as duas regiões, já na dependência do ângulo θ , podemos claramente notar que m_z abre um gap de energia suprimindo a condutividade quando a energia de Fermi

está contida entre o gap de uma ou das duas regiões, o que pode ser notado em $\theta = 0, \pi$ para quando é desconsiderado o efeito do segundo ferromagneto; o caso interessante se manifesta com o efeito do segundo ferromagneto no qual a condução é alta em $\theta = 0$ (paralelo) para $V = 0$ (aplicado no sentido da condutividade de tunelamento) e também em $\theta = \pi$ (anti-paralelo) para $V = 2E$, estando relacionado a magneto-resistência para o qual é vantajoso para a condutância a configuração de spins paralelos, sendo no caso da junção p-n a conexão entre as funções de onda nas duas regiões para o elétron e buraco serem mais semelhantes quando a magnetização são em direções opostas, devido a inversão de bandas do isolante topológico. Tal característica de condução é única, associada ao transporte de cargas na superfície de isolantes topológicos.

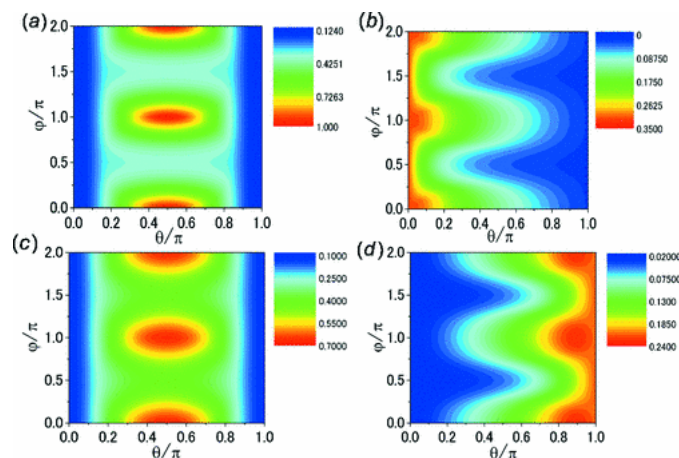


Figura 38: Mapa de condutância em função das coordenadas polares da magnetização de $F1$. (a, c) temos $m_2 = 0$; (b, d) temos $m_2 = \sqrt{0, 9E}$. Sendo que em (a, b) temos uma junção n-n com $V = 0$ e em (c, d) uma junção p-n com $V = 2E$ [109].

4.2 Impureza Magnética Isolada

O próximo caso de interação que será analisado são os efeitos gerados devido à uma impureza magnética isolada na superfície de um isolante topológico tridimensional, no qual será primeiro considerado a Hamiltoniana que descreve a interação de uma única impureza magnética através da aproximação de campo médio^[117] :

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\vec{r}} M_i(\vec{r}) s_i(\vec{r}), \quad i = x, y, z. \quad (82)$$

A equação (82) leva em consideração a interação de um spin clássico localizado na origem, no qual será imposto algumas restrições, incluindo considerar o spin polarizado no eixo-z,

logo $M_x = M_y = 0$, e também considerar o alcance finito da interação de troca na seguinte forma $M_z(\vec{r}) = M_0\Theta(r_0 - r)$, que corresponde à uma barreira cilíndrica de potencial com a função degrau $\Theta(r_0 - r)$, sendo r_0 o alcance da interação de troca ou o raio da barreira, onde $M_0 = J_z\langle S_z \rangle$. Temos então que a Hamiltoniana de superfície do isolante topológico somada com a Hamiltoniana de interação (82) com as restrições será:

$$\hat{\mathcal{H}}_\bullet = \hat{\mathcal{H}}_{sup} + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{k,\alpha,\beta} \psi_{k\alpha}^\dagger \hbar v_F (k_x \sigma_{\alpha\beta}^x + k_y \sigma_{\alpha\beta}^y) \psi_{k\beta} + \sum_{\vec{r}} M_0 \Theta(r_0 - r) s_z(\vec{r}), \quad (83)$$

que pode ser resolvido pela equação estacionária $\mathcal{H}_\bullet(k_i \rightarrow -i\partial_i)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ no qual consideramos o sistema confinado em uma região grande de tamanho \mathbf{R} , assim:

$$\mathcal{H}_\bullet\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} M_0\Theta(r_0 - r) & -i\hbar v_F(\partial_x - i\partial_y) \\ -i\hbar v_F(\partial_x + i\partial_y) & -M_0\Theta(r_0 - r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(\vec{r}) \\ \phi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} = E\psi(\vec{r}), \quad (84)$$

esse é um problema de simetria azimutal com solução analítica para as funções de onda dada pelas funções de Bessel^[118].

Usando coordenadas cilíndricas em (84), obtemos o seguinte conjunto de equações de primeira ordem acopladas:

$$(M_0\Theta(r_0 - r) - E)\phi_A(\vec{r}) = i\hbar v_F e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \phi_B(\vec{r}), \quad (85)$$

$$-(M_0\Theta(r_0 - r) + E)\phi_B(\vec{r}) = i\hbar v_F e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \phi_A(\vec{r}), \quad (86)$$

em que a dependência da componente angular da função de onda pode ser expressa da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(\vec{r}) \\ \phi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} = e^{im\varphi} \begin{pmatrix} \phi_a(r) \\ ie^{i\varphi}\phi_b(r) \end{pmatrix}, \quad (87)$$

sendo m o número quântico associado ao autoestado do momento angular. Assim, a dependência radial pode ser expressa como:

$$(M_0\Theta(r_0 - r) - E)\phi_a(r) = -\left(\frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r} \right) \phi_b(r), \quad (88)$$

$$-(M_0\Theta(r_0 - r) + E)\phi_b(r) = \left(\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right) \phi_a(r), \quad (89)$$

desacoplando as equações (88) e (89), teremos então duas equações de segunda ordem:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} \right) \phi_a(r) = ([M_0 \Theta(r_0 - r)]^2 - E^2) \phi_a(r) \quad (90)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \phi_b(r) = ([M_0 \Theta(r_0 - r)]^2 - E^2) \phi_b(r) \quad (91)$$

com a solução da função de onda sendo então dada pelas funções de Bessel:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \phi_A(\vec{r}) \\ \phi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} = e^{im\varphi} \begin{pmatrix} C_1 J_m(kr) \\ ie^{i\varphi} C_1 J_{m+1}(kr) \end{pmatrix} \quad \text{para } r < r_0, \quad (92)$$

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \phi_A(\vec{r}) \\ \phi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} = e^{im\varphi} \begin{pmatrix} C_2 J_m(Er) + C_3 Y_m(Er) \\ ie^{i\varphi} [C_2 J_{m+1}(Er) + C_3 Y_{m+1}(Er)] \end{pmatrix} \quad \text{para } r_0 \leq r < R, \quad (93)$$

com $k = \sqrt{E^2 - [M_0 \Theta(r_0 - r)]^2}$, no qual os autovalores e os coeficientes (C_1, C_2, C_3) podem ser obtidos pelas condições de contorno do sistema dadas por:

$$\begin{aligned} C_1 J_m(kr_0) &= C_2 J_m(Er_0) + C_3 Y_m(Er_0), \\ C_1 J_{m+1}(kr_0) &= C_2 J_{m+1}(Er_0) + C_3 Y_{m+1}(Er_0), \\ C_2 J_m(ER) + C_3 Y_m(ER) &= 0. \end{aligned} \quad (94)$$

Nas condições de contorno (94), ao considerar a região grande de tamanho $\mathbf{R} \rightarrow \infty$, as funções de Bessel irão tender ao limite assintótico^[119], de forma que os coeficientes (C_2, C_3) serão:

$$C_2 = \text{sen} \left(ER - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} \right), \quad C_3 = -\text{cos} \left(ER - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} \right), \quad (95)$$

com o coeficiente C_1 obtido pela condição de normalização da função de onda tomada no limite assintótico $\int_0^{2\pi} \int_0^R \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) r dr d\varphi = 1$, em que se considera a relação de ortogonalidade da função de Bessel $\int_0^{r_0} J_m(kr) J_m(kr) r dr = (r_0^2/2) [J'_m(kr_0)]^2$ e a relação de restrição $(C_2)^2 + (C_3)^2 = 1$.

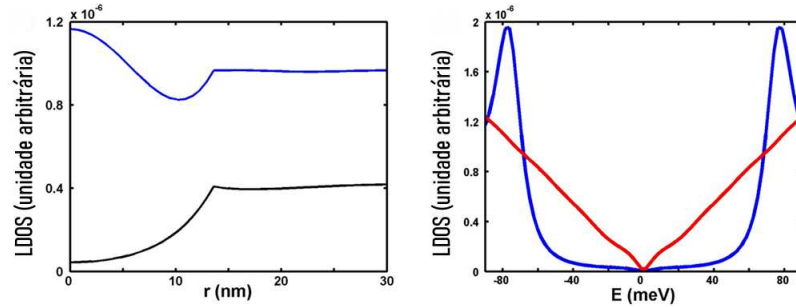
É interessante analisar que a função de onda (92) na região de impureza, possui um comportamento progressivo para energias $|E| < |M_0|$ quando a função de Bessel assume um argumento imaginário e um comportamento oscilatório para energias $|E| > |M_0|$ quando a função de Bessel assume um argumento real. Já os efeitos reais gerados pela impureza magnética podem ser analisados pelo estudo da densidade local de estados (LDOS), definida por $\rho_0(\vec{r}, E) = -\frac{1}{2\pi} \Im \{ \text{Tr} [G^R(\vec{r}, \vec{r}', E)] \}$ de forma que está relacionada a parte imaginária do traço da função de Green retardada para uma partícula, dada por^[120]:

$$G^R(\vec{r}, \vec{r}', E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_m i \frac{\psi_m(\vec{r}) \psi_m^*(\vec{r}')}{E - E_m + i\eta} \quad (96)$$

sendo:

$$\psi_m(\vec{r}) \psi_m^*(\vec{r}') = \begin{pmatrix} \phi_A(\vec{r}) \phi_A^*(\vec{r}') & \phi_A(\vec{r}) \phi_B^*(\vec{r}') \\ \phi_B(\vec{r}) \phi_A^*(\vec{r}') & \phi_B(\vec{r}) \phi_B^*(\vec{r}') \end{pmatrix}. \quad (97)$$

Para tal densidade local de estados, temos que ela é suprimida para um alcance de energia $|E| < |M_0|$, Figura 39 (imagem à esquerda), em um alcance espacial $r < r_0$ dentro do potencial da impureza magnética, já quando se está fora da região de impureza magnética a densidade local de estados converte rapidamente para $|E|/2\pi\hbar^2v_F^2$, como esperado para uma região sem impureza magnética. Pela análise direta da energia pela densidade local de estados, também se torna possível observar que na região da impureza magnética ($r = 0$) se abre um gap na energia como esperado, Figura 39 (imagem à direita), e que em uma região distante de r_0 não se observa tal gap de energia, mantendo o estados preservados.



$$\rho_0(\mathbf{r}, E) = -\frac{1}{2\pi} \Im \left\{ \text{Tr} \left[G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \right] \right\}$$

Figura 39: Densidade local de estados plotado com $r_0 = 13nm$ e $M_0 = 50meV$. Dado em função da distancia r da impureza para elétrons com energia $E = 30meV$ (linhas pretas) e $E = 70meV$ (linhas azuis) (imagem à esquerda); Dado em função da energia E para distância $r = 0$ (região da impureza magnética) (linhas azuis) e $r = 20nm$ (região distante de r_0) (linhas vermelhas) (imagem à direita) ^[117].

É interessante também analisar o comportamento da densidade local de estados de spin, definida por $\rho_i(\vec{r}, E) = -\frac{1}{2\pi} \Im \left\{ \text{Tr} \left[G^R(\vec{r}, \vec{r}', E) \sigma_i \right] \right\}$, sendo σ_i as matrizes de Pauli e $i = x, y, z$. Com exceção da componente ρ_z o sistema não pode mais ser resolvido analiticamente devido a falta de simetria azimutal, cuja solução numérica para o vetor de spin $\rho_s(\vec{r}, E) = (\rho_x, \rho_y, \rho_z)$ pode ser obtida pelo formalismo de T-matrix^[121, 122]. O comportamento de $\rho_s(\vec{r}, E)$ pode ser analisado para dois casos interessantes; o primeiro correspondendo a distribuição de spins devido à uma impureza magnética com componente no eixo- z positivo, Figura 40 (imagem

à esquerda), onde vemos que a magnetização não induz apenas um movimento no eixo- z da densidade local de estados de spin, mas também no plano- xy devido ao acoplamento spin-órbita nos estados de superfície, por exemplo, um elétron com componente de spin no eixo- z que se move na direção x irá realizar uma precessão no plano- yz , de modo que uma simetria de rotação no eixo- z é quebrada; o segundo correspondendo a distribuição de spins devido à uma impureza magnética com componente no eixo- y positivo no plano da superfície, Figura 40 (imagem à direita), onde vemos que por simetria é semelhante ao primeiro caso devido ao acoplamento spin-órbita produzir uma precessão de modo que uma simetria de rotação no eixo- y é quebrada, com a diferença que nesse caso existe uma simetria discreta de π -rotação no eixo- z apresentando uma transformação com simetria de reversão temporal.

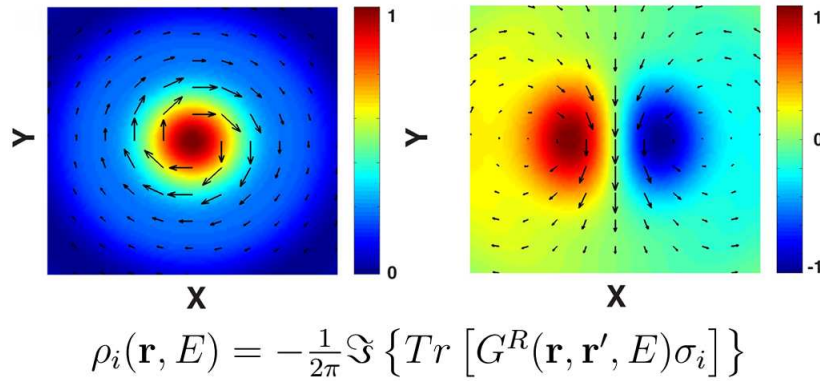


Figura 40: Densidade local de estados de spin plotado com $r_0 = 13nm$, $M_0 = 50meV$ e $E = 10meV$. Onde as setas indicam a componente de spin no plano- xy e a mudança de coloração indicam a componente de spin no eixo- z . Para uma impureza magnética na direção z (imagem à esquerda); Para uma impureza magnética na direção y (imagem à direita)^[117].

Temos então que uma impureza magnética isolada, com componente magnética perpendicular a superfície, irá abrir um gap de energia em sua proximidade, diferentemente de uma impureza não magnética. Como cada impureza magnética abre um gap em sua vizinhança, na aproximação de campo médio se espera que uma distribuição uniforme produza a abertura de gap em toda a superfície do isolante topológico, Figura 41 (c), diferentemente do caso de impurezas não-magnéticas, Figura 41 (a), que não alteram a estrutura do cone de Dirac produzindo apenas um deslocamento no nível de Fermi. Um exemplo se dá na dopagem de Bi_2Se_3 , observado utilizando ARPES (Angle Resolved Photoemission Spectroscopy) onde pode se ver que uma dopagem de 10% de uma impureza não magnética $[(Bi_{0.9}Tl_{0.1})_2Se_3]$ desloca o ponto de Dirac sem produzir uma abertura de gap, Figura 41 (b), enquanto que uma dopagem com impureza magnética separa o cone de Dirac superior do inferior, para uma dopagem de 12% de uma impureza magnética $[(Bi_{0.88}Fe_{0.12})_2Se_{3.7}]$ e 16% de $[(Bi_{0.84}Fe_{0.16})_2Se_{3.7}]$, Figura 41

(d).

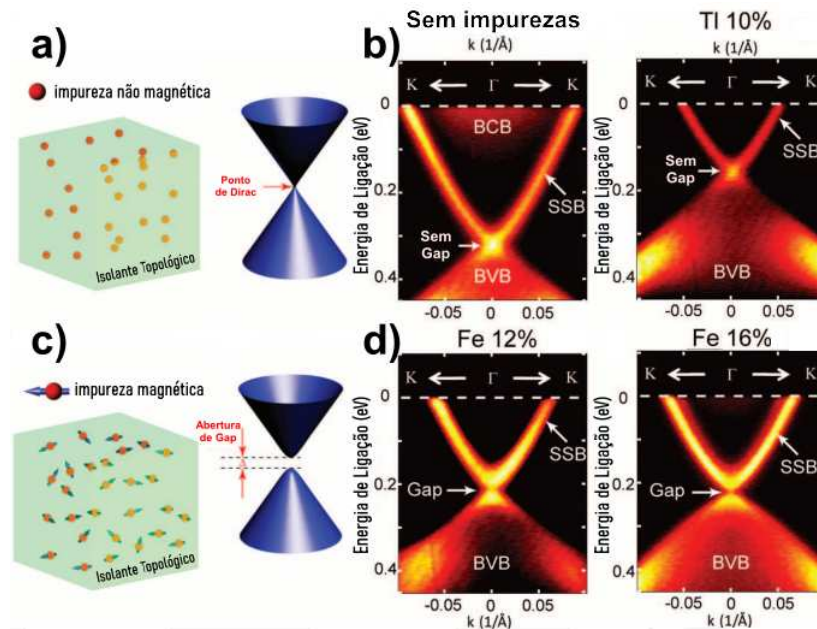


Figura 41: (a) Estados de superfície topologicamente protegidos contra impurezas não-magnéticas; (b) ARPES demonstrando um deslocamento no nível de Fermi devido a dopagem de 10% de impureza não magnética $[(Bi_{0.9}Tl_{0.1})_2Se_3]$; (c) Abertura de um gap de energia devido a impurezas magnéticas; (d) ARPES demonstrando a abertura de gap devido a dopagem de impurezas magnéticas para 12% de $[(Bi_{0.88}Fe_{0.12})_2Se_{3.7}]$ e 16% de $[(Bi_{0.84}Fe_{0.16})_2Se_{3.7}]$ [69].

Porém apesar de na aproximação de campo médio uma distribuição uniforme de impurezas magnéticas produzir um gap na superfície do isolante topológico, não necessariamente será verdade para uma distribuição que não seja uniforme, mesmo que a magnetização seja perpendicular a superfície. Um exemplo se dá no caso do ferromagneto com uma parede de domínio devido a magnetizações opostas, gerando uma condução quiral nos estados de borda discutido previamente, Figura 37 (a), de modo que nem em toda superfície há abertura de gap, restando modos sem gap na interface da parede de domínio.

4.3 Vórtice

Outro caso interessante são os efeitos gerados devido a presença de um filme fino ferromagnético com solução de vórtice magnético, acoplado na superfície de um isolante topológico tridimensional. Tal vórtice com spins alinhados na superfície irá quebrar a simetria de reversão temporal, sem que com isso abra uma gap de energia na superfície, gerando um estado ligado que gera uma nova configuração nos estados eletrônicos que produz estados de

modo zero carregados e confinados em uma região circular em torno do vórtice, contidos na superfície do isolante topológico^[6].

O vórtice em questão será descrito pelo modelo de Heisenberg de plano-fácil, equação (18), com $0 < \lambda < 1$, que favorece um alinhamento no plano- xy . No qual iremos tomar um caso onde um λ_c crítico separa as soluções topológicas tipo vórtice em duas estatísticas diferentes, $\lambda < \lambda_c$ no qual a configuração de estabilidade favorece todos os spins ficarem confinados no plano- xy e $\lambda > \lambda_c$ no qual a configuração de estabilidade permite que tenha spins próximos do centro do vórtice com alinhamento no sentido do eixo- z ; sendo o vórtice do problema contido no plano- xy para $0 < \lambda < \lambda_c$, a sua descrição no limite contínuo dada por:

$$\varepsilon_v = \cos \Theta = 0 \quad \Phi_v = q_v \arctan \left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right) + \Phi_0, \quad (98)$$

onde os escalares Φ_v e $\varepsilon_v = \cos \Theta$ parametrizam o campo de spin \vec{S} associado a sua magnetização:

$$\vec{M} = M\vec{S} = M(\sqrt{1 - \varepsilon_v^2} \cos \Phi_v, \sqrt{1 - \varepsilon_v^2} \sin \Phi_v, \varepsilon_v), \quad (99)$$

com q_v em (98) sendo a vorticidade associada a carga topológica (1 para vórtice, -1 para anti-vórtice, $[2, -2]$ vórtices e anti-vórtices de ordem superior...) e Φ_0 a constante que caracteriza sua configuração. Em todos os casos iremos considerar um vórtice planar $q_v = 1$ centrado em $(x_0, y_0) = (0, 0)$ para que $\Phi_v = \theta + \Phi_0$, condicionando as componentes de magnetização em (99) de forma que:

$$\vec{M}(\vec{r}) = M_r \hat{r} + M_\theta \hat{\theta} = M \cos(\theta + \Phi_0) \hat{r} + M \sin(\theta + \Phi_0) \hat{\theta}, \quad (100)$$

tendo a restrição de $|\vec{M}|^2 = M^2$ ser constante, com a magnetização tipicamente na ordem de $M \sim 50 meV$. Observe que existem duas configurações de magnetização interessantes em (100) para o vórtice planar, $\Phi_0 = 0$ implica que a componente radial do spin rotaciona junto com θ e portanto temos $(M_r, M_\theta) = (M, 0)$ caracterizando um vórtice radial, Figura 42 (imagem à direita), já para $\Phi_0 = \pm\pi/2$ temos que a componente radial do spin rotaciona em um ângulo reto (perpendicular) com θ e portanto temos $(M_r, M_\theta) = (0, \pm M)$ com $M > 0$ caracterizando um vórtice comum ou rotacional (de sentido horário ou anti-horário), Figura 42 (imagem à esquerda).

Iremos considerar a Hamiltoniana de superfície para o isolante topológico acrescida do limite contínuo da interação do modelo de Heisenberg de plano-fácil, com $0 < \lambda < \lambda_c < 1$ para a componente de anisotropia. Portanto, para um vórtice dentro do plano, a Hamiltoniana

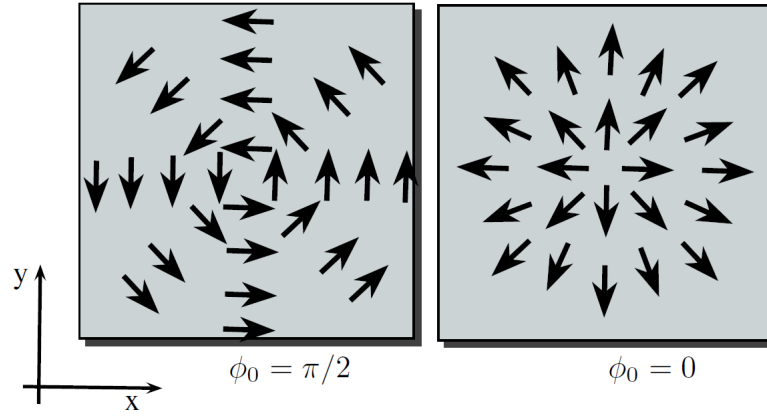


Figura 42: Campo de magnetização \vec{M} (setas pretas) com vorticidade $q_v = 1$ para: vórtice comum ou rotacional de sentido anti-horário com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = \pi/2$ (imagem à esquerda); vórtice radial com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = 0$ (imagem à direita)^[6].

de superfície acoplada a tal magnetização é^[6] :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\odot} &= \hat{\mathcal{H}}_{sup} + \hat{\mathcal{H}}_{int} \\ &= \sum_{k,\alpha,\beta} \psi_{k\alpha}^{\dagger} \hbar v_F (k_x \sigma_{\alpha\beta}^x + k_y \sigma_{\alpha\beta}^y) \psi_{k\beta} + \sum_{k,\alpha,\beta} \psi_{k\alpha}^{\dagger} \left(M_r \hat{r} + M_{\theta} \hat{\theta} \right) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{k\beta}, \end{aligned} \quad (101)$$

que pode ser resolvido analiticamente pela equação estacionária $\mathcal{H}_{\odot}(k_i \rightarrow -i\partial_i)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ no qual consideramos o sistema em coordenadas polares (r, θ) , com a função de onda:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} e^{im\theta} \varphi(r) \\ e^{i(m+1)\theta} \chi(r) \end{pmatrix}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3... \quad (102)$$

sendo m o número quântico associado ao autoestado do momento angular, cuja função de onda se resolve pelo conjunto de equações acopladas para $\varphi(r)$ e $\chi(r)$:

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r} - \frac{M_{\theta} - iM_r}{\hbar v_F} \right) \chi(r) = i \frac{E}{\hbar v_F} \varphi(r), \quad (103)$$

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} + \frac{M_{\theta} + iM_r}{\hbar v_F} \right) \varphi(r) = i \frac{E}{\hbar v_F} \chi(r), \quad (104)$$

com v_F a velocidade de Fermi.

A Hamiltoniana em (101) possui o termo de interação para o vórtice que não está associado à uma componente perpendicular ao plano no eixo- z , de forma que não é possível ter um termo de massa $m_z \sigma^z$ para abrir um gap de energia proporcional a $2|m_z|$, violando a simetria de

reversão temporal. Porém nesse nosso caso, apesar de não ter um gap de energia, existirá uma condição que produz estados de modo zero carregados e confinados em uma região circular, modificando a corrente efetiva de Spin $J_s = (\hbar/2c)(J_\uparrow - J_\downarrow)$ e com isso violando a simetria \mathcal{T} .

Analisando as equações acopladas (103) e (104), O termo associado a $\pm iM_r$ movimenta os estados eletrônicos impedindo de se manterem ligados ao centro $(x_0, y_0) = (0, 0)$ do vórtice, semelhante a um efeito de um potencial centrífugo, de modo que qualquer contribuição radial de M_r irá dominar sobre os estados ligados com energia $E < |\vec{M}|$, implicando em estados que nunca serão inteiramente polarizados; no caso completamente radial $(M_r, M_\theta) = (M, 0)$ onde temos $\Phi_0 = 0$, não há nem soluções de energia normalizadas para $E \leq 0$, produzindo apenas estados espalhados. Portanto, o caso interessante a ser analisado para se olhar os estados ligados e de modo zero ocorre quando $M_r = 0$ e portanto $(M_r, M_\theta) = (0, \pm M)$ onde temos $\Phi_0 = \pm\pi/2$.

Os estados de modo zero podem então ser analisados quando temos o vórtice planar com $M_r = 0$ de modo que $M_\theta \pm iM_r \rightarrow M$ nas equações acopladas (103) e (104), que se tornam desacopladas quando tomamos $E = 0$. Assim, temos dois casos que podem se analisados de solução para a função de onda (102), o primeiro caso corresponde a um vórtice com rotação no sentido horário com magnetização $(M_r, M_\theta) = (0, -M)$, de modo que sua função de onda será:

$$\psi(\vec{r})_\circ = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi(|2m+1|!)}} \left(\frac{2M}{\hbar v_F} \right)^{|m+1/2|+1/2} \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{e^{-\frac{M}{\hbar v_F} r}}{r^{m+1}} e^{i(m+1)\theta}, \quad (105)$$

cujas amplitudes em colchetes são normalizadas apenas para casos com $2m+1 < 0$. Sendo a solução (105) correspondendo aos estados de férmions de modo zero, sendo tais estados concentrados em uma região circular de raio $r_0 = \hbar v_F/|M|$ centrada em torno do vórtice, estando contidos na superfície do isolante topológico. A magnetização do vórtice horário induz um alinhamento dos elétrons de superfície em sua direção, Figura 43 (imagem à esquerda), produzindo um estado spin polarizado $S_\theta = -\frac{\hbar}{2}$ que quebra a simetria de reversão temporal da superfície sem gerar um gap de massa, sendo que tal configuração possibilita então a existência de uma corrente de spin polarizada de modo zero. O segundo caso corresponde a um vórtice com rotação no sentido anti-horário com magnetização $(M_r, M_\theta) = (0, M)$, de modo que sua função de onda será:

$$\psi(\vec{r})_\circ = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi(|2m+1|!)}} \left(\frac{2M}{\hbar v_F} \right)^{m+1} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{M}{\hbar v_F} r} r^m e^{im\theta}, \quad (106)$$

cujas amplitudes em colchetes são normalizadas apenas para casos com $2m+1 > 0$. Sendo a

solução (106) correspondendo também a estados de férmions de modo zero concentrados em uma região circular de raio $r_0 = \hbar v_F / |M|$ centrada em torno do vórtice, estando contidos na superfície do isolante topológico, com r_0 em geral na ordem de $\sim 10^{-9}$ m. A magnetização do vórtice anti-horário induz um alinhamento dos elétrons de superfície em sua direção, Figura 43 (imagem à direita), produzindo um estado spin polarizado $S_\theta = +\frac{\hbar}{2}$ que quebra a simetria \mathcal{T} da superfície sem gerar um gap de massa, sendo que tal configuração é equivalente e também possibilita a existência de uma corrente de spin polarizada de modo zero. Em ambos os casos, os estados de férmions de modo zero são carregados com uma carga eletrônica inteira, dada por:

$$Q/e^- = \int d^2r j^0 = \int d^2r \psi^\dagger \psi = 1, \quad (107)$$

no qual basicamente é o acoplamento da magnetização do vórtice com o momento angular orbital dos férmions de modo zero levando a tal carga eletrônica polarizada, concentrada na região de raio r_0 centrada no vórtice.

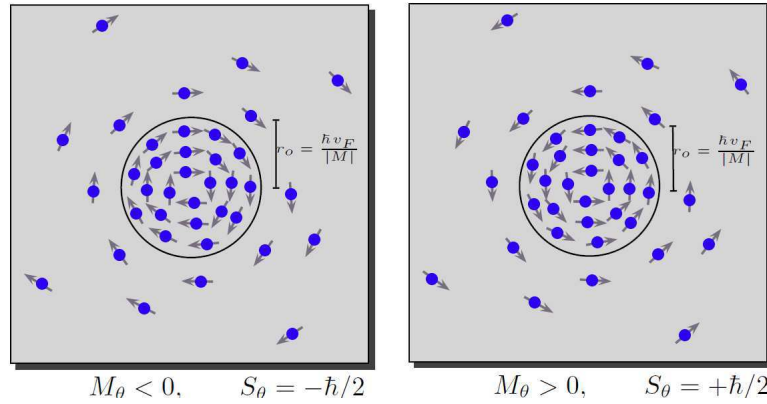


Figura 43: Estados de Férmions de modo zero na superfície do isolante topológico, concentrados em uma região de raio r_0 . Alinhados com a magnetização do vórtice de sentido horário (imagem à esquerda); alinhados com a magnetização do vórtice de sentido anti-horário (imagem à direita) [6].

Por fim, os estados ligados podem ser obtidos do conjunto de equações acopladas (103) e (104), considerando dessa vez a energia $E < |\vec{M}|$, de modo que a equação estacionária $\mathcal{H}_\odot(k_i \rightarrow -i\partial_i)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$, tem soluções de energia da seguinte forma:

$$E = E(n, m) = \pm |\vec{M}| \left[1 - \frac{(m + 1/2)^2}{(n + |m| + 1/2)^2} \right]^{1/2}, \quad \text{com} \begin{cases} n = 1, 2, 3, \dots \\ m = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \end{cases} \quad (108)$$

cujas soluções correspondem aos modos internos no qual a função de onda dos elétrons realiza oscilações harmônicas em torno do ponto central $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com funções de onda normalizadas possíveis para $M(2m + 1) > 0$. Dos estados de energia em (108) vemos que os níveis de energia com estados ligados para $E < 0$ vão de um espectro quase contínuo em $E = -M$ até $E = -2\sqrt{2}M/3 \approx -0,9428M$, com um gap de energia de $E = -2\sqrt{2}M/3$ até os estados de modo zero $E = 0$; já níveis de energia com estados ligados para $E > 0$ vão de um espectro quase contínuo em $E = +2\sqrt{2}M/3 \approx +0,9428M$ até $E = M$, com um gap de energia dos estados de modo zero $E = 0$ até $E = +2\sqrt{2}M/3$. Tais estados ligados são simétricos em relação aos estados de modo zero, e se comportam de modo semelhante aos de modo zero, com os elétrons ligados se movendo conjuntamente na direção de magnetização dada pelo vórtice, tanto que os estados ligados como os de modo zero decaem exponencialmente com $e^{-Mr/(\hbar v_F)}$.

Uma análise final interessante se faz em relação a como a provável corrente de spin polarizada de modo zero irá se comportar nos estados ligados do espectro de energia (108). Considere que o espectro quase contínuo para os estados ligados de energia negativa $-M < E < -2\sqrt{2}M/3$ associados à uma banda de valência estejam cheios ou parcialmente cheios e que através de um campo elétrico sejam excitados para estados de energia positiva $+2\sqrt{2}M/3 < E < +M$ associados à uma banda de condução, temos então que a transição da corrente pelo gap de energia $-2\sqrt{2}M/3 < E < +2\sqrt{2}M/3$ levará à uma função salto no estado de condução se assemelhando a um dos platôs do efeito Hall quântico quando se aumenta o campo magnético.

4.4 Skyrmion

O último caso a ser analisado são os efeitos de interação gerados devido a presença de skyrmions do tipo Néel ou do tipo Bloch, acoplados na superfície de um isolante topológico tridimensional. A partir das estruturas de bandas para os dois tipos de skyrmions nota-se que existem diferenças interessantes entre eles, no qual o do tipo Bloch apresenta a simetria de quiralidade e número de Chern entre bandas opostas, enquanto o do tipo Néel não apresenta tais simetrias^[123].

O skyrmion em questão é descrito pelo modelo de Heisenberg isotrópico, equação (17), porém sua solução como defeito topológico aparece no modelo- σ não linear $O(3)$ que são soluções de campo estável na aproximação de campo médio para o modelo isotrópico. Sendo a descrição da magnetização do skyrmion no limite contínuo dada por:

$$\vec{M}(r, \phi) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - M_z(r)^2} \cos(\phi + \Phi_0) \\ \sqrt{1 - M_z(r)^2} \sin(\phi + \Phi_0) \\ M_z(r) \end{pmatrix}, \quad (109)$$

onde o argumento Φ_0 é semelhante ao caso discutido sobre os vórtices, que nesse caso será correspondente a $\Phi_0 = 0$ para a caracterização de skyrmions do tipo Néel, Figura 44 (b), no qual além da componente radial do spin rotacionar junto com ϕ , ela também rotaciona em relação ao eixo- z (obedecendo $M_z(r)$) no plano da componente radial; já para o caso $\Phi_0 = \pm\pi/2$ a caracterização dada é de skyrmions do tipo Bloch, Figura 44 (a), no qual além da componente radial do spin rotacionar em um ângulo reto (perpendicular) com ϕ , ela também rotaciona em relação ao eixo- z (obedecendo $M_z(r)$) no plano da componente radial.

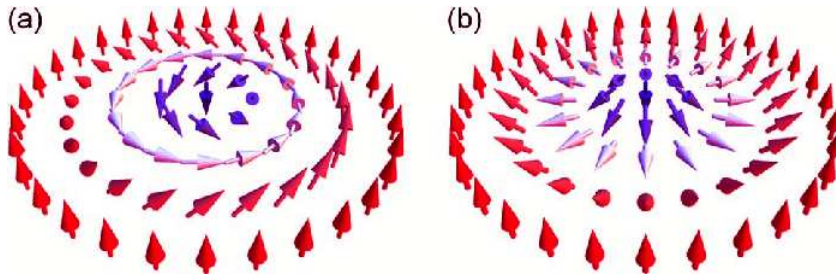


Figura 44: (a) Configuração de spins para um skyrmion do tipo Bloch com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = \pi/2$; Configuração de spins para um skyrmion do tipo Néel com parâmetro de caracterização $\Phi_0 = 0$ [124].

Para a magnetização $\vec{M}(r, \phi)$ em (109), a componente de magnetização $M_z(r)$ fora do plano possui algumas restrições, com um aumento suave de $M_z(0) = -1$ no centro do skyrmion ($r = 0$) até o valor $M_z(0) = +1$ a partir de um raio ($r > R_0$) que limita o alcance da interação do skyrmion de raio R . Sendo a magnetização $M_z(r)$ parametrizada para esse caso como:

$$M_z(r) = \begin{cases} -1 & r \in [0, \alpha R_0] \\ 2 \sin^2 \left(\frac{\pi(r - \alpha R_0)}{2(R_0 - \alpha R_0)} \right) - 1 & r \in (\alpha R_0, R_0) \\ +1 & r \geq R_0 \end{cases}, \quad (110)$$

cujo parâmetro α , serve para suavizar a inversão de $M_z(r)$, de modo que $\alpha \rightarrow 1$ produz uma mudança abrupta de $M_z(r) = -1 \rightarrow 1$ em R_0 e com isso tornando indistinguível um skyrmion do tipo Néel do tipo Bloch, assim tomaremos $\alpha \in [0, 1)$. O raio do skyrmion é dependente do parâmetro α , sendo $R = R_0(1 + \alpha)/2$.

Para a modelagem do problema os skyrmions serão descritos por uma rede triangular

de Bravais, com os skyrmions centrados nos vetores de Bravais, $\vec{r} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2$, com $m_{1,2} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, Figura 45, onde cada vetor é dado por $\vec{a}_1 = a(1, 0)$ e $\vec{a}_2 = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$. Devido a possibilidade de os skyrmions na rede se sobreporem e com isso $M_z(r \geq R_0) \neq +1$, é dada a condição de $a > 2R_0$ permitindo um aumento suave na magnetização sem que o alcance da interação de um skyrmion afete o outro.

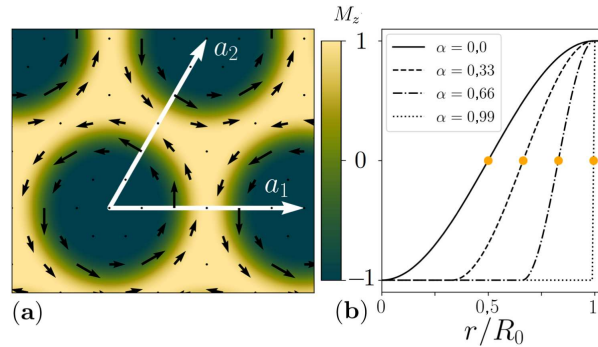


Figura 45: (a) plot de uma rede de skyrmions do tipo Bloch com vetores de Bravais \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , para parâmetros $\alpha = 0,5$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,49$. Com a coloração correspondendo a $M_z(r) = -1 \rightarrow +1$ e os vetores em preto aos spins no plano; (b) magnetização em função da distância para diferentes α , sendo o ponto laranja correspondente ao ponto onde ocorre a mudança de sinal na magnetização na distância de raio R do skyrmion [123].

Portanto, para uma rede de skyrmions, a Hamiltoniana de superfície do isolante topológico acoplada a magnetização (109) será:

$$\mathbf{H}_{\otimes} = v_F \int_{\mathbb{R}^2} c^\dagger(\vec{r}) \left[\left(-i\hbar \frac{d}{d\vec{r}} \times \sigma \right) \cdot \hat{z} \right] c(\vec{r}) d^2\vec{r} + \frac{\hbar v_F J}{a} \int_{\mathbb{R}^2} c^\dagger(\vec{r}) \vec{M}(r, \phi) \cdot \vec{\sigma} c(\vec{r}) d^2\vec{r}, \quad (111)$$

no qual $c^\dagger c$ são os operadores criação e destruição para um dado elétron na posição \vec{r} e $J > 0$ a constante de acoplamento entre vizinhos próximos. Para análise da estrutura de bandas para o skyrmion, precisamos reescrever a Hamiltoniana (111) no espaço de momento $\mathcal{H}_{\otimes}(K) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \mathbf{H}_{\otimes} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, e então aplicar para a primeira zona de Brillouin da rede de skyrmions.

Skyrmions do tipo Bloch: com constante de configuração $\Phi_0 = \pm\pi/2$, acoplado a superfície de um isolante topológico apresenta uma estrutura de bandas com algumas simetrias interessantes. Tal acoplamento apresenta a simetria de quiralidade $\sigma_z \mathcal{H}_{\otimes}(K) \sigma_z^{-1} = -\mathcal{H}_{\otimes}(K)$ (ou na notação de anticomutador $\{\mathcal{H}_{\otimes}(K), \sigma_z\}$), tendo também por implicação à simetria de partícula-buraco Ξ , que está relacionada com simetria para o número de Chern C entre bandas de energia oposta serem de sinal oposto $C_{-n} = -C_n$, Figura 46. Temos que

para valores baixos da razão R/R_0 do raio do skyrmion para o raio de alcance da interação, é obtido estados com gap de energia para as bandas secundárias de condução e valência apresentando número de Chern zero, Figura 46 (a), para tal configuração de magnetização os estados de superfície são de Dirac massivo; porém existe um valor crítico da razão R/R_0 em que as bandas de valência e condução se cruzam fechando o gap de energia no ponto Γ apresentando números de Chern $C = (0, -1 : 1, 0)$ para as quatro bandas mais próximas da energia zero (:), Figura 46 (b), tal configuração de magnetização produz estados de superfície de Dirac sem massa com densidade de estados de dispersão linear; por último para valores da razão R/R_0 acima do crítico, as bandas de valência e condução abrem novamente um gap de energia, porém as bandas secundárias e terciárias se cruzam fechando o gap de energia no ponto Γ , Figura 46 (c), apresentando números de Chern $C = (1, -1 : 1, -1)$ para as quatro bandas mais próximas da energia zero.

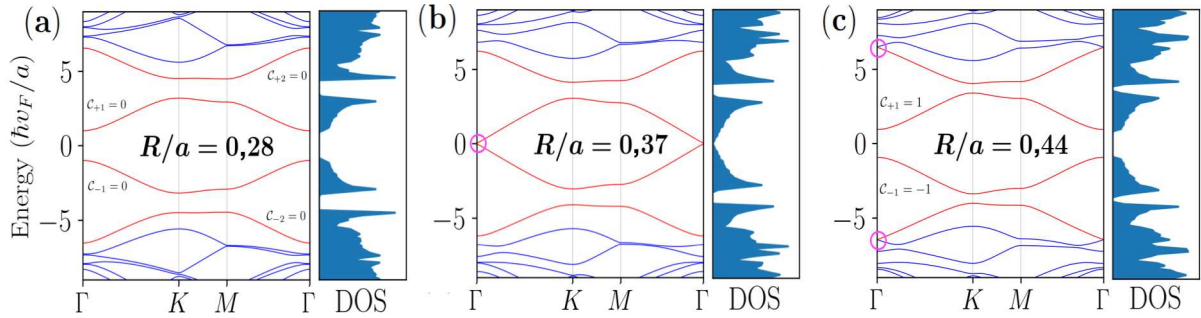


Figura 46: Estrutura de bandas para skyrmions do tipo Bloch acoplado a superfície de um isolante topológico e sua respectiva densidade de estados (DOS), com parâmetros fixos $J = 3$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,49$. (a) para $R/a = 0,28$, apresentando abertura de gap; (b) para $R/a = 0,37$, sem gap de energia (circulado); (c) para $R/a = 0,44$, apresentando abertura de gap na banda primária e ausência de gap nas bandas secundárias e terciárias (circulado) ^[123].

Skyrmions do tipo Néel: com constante de configuração $\Phi_0 = 0$, acoplado a superfície de um isolante topológico apresenta algumas quebras de simetrias em sua estrutura de bandas. Em tal acoplamento o divergente da magnetização $\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(r, \phi)$ no plano apresenta a peculiaridade de que nenhuma transformação de calibre consegue remover tais componentes planares de magnetização, sacrificando com isso as simetrias de quiralidade em relação a energia zero e a simetria de partícula-buraco, não tendo uma curvatura de Berry associada, Figura 47. Para tal magnetização não existe uma configuração que permita estados sem gap de energia na banda de condução e valência próximas da energia zero, porém alguns valores da razão R/R_0 é possível obter estados de gap zero em bandas secundárias e terciárias como também números de chern associados não nulos, $C = (0 : 0, 1, 1)$, Figura 47 (a),

$C = (0 : 0, 0, 2)$, Figura 47 (b). Apesar de de tal caso não apresentar simetria Ξ , é possível no limite em que $R \rightarrow R_0$ se aproxima de uma parede de domínio entre skyrmions, ter uma equivalência entre as funções de onda para energia positiva e negativa quando aplicado o operador de spin no eixo- z ($\mathcal{H} \otimes (K)\sigma_z |\psi_E\rangle = -E|\psi_E\rangle \Rightarrow \sigma_z |\psi_E\rangle = |\psi_{-E}\rangle$) e com isso a simetria partícula-buraco, Figura 47 (c).

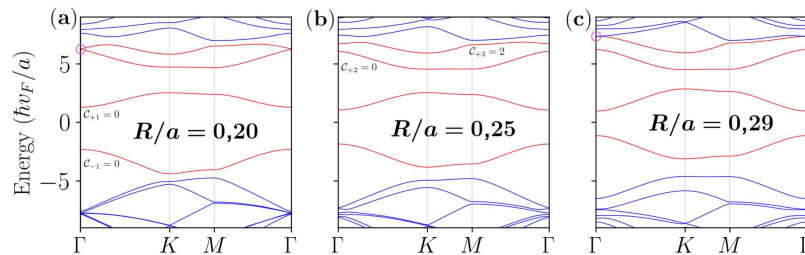


Figura 47: Estrutura de bandas para skyrmions do tipo Néel acoplado a superfície de um isolante topológico, com parâmetros fixos $J = 3$ e raio de limite de alcance das interações $R_0/a = 0,3$, com todos apresentando abertura de gap. (a) para $R/a = 0,20$, com ausência de gap nas bandas secundárias e terciárias (circulado); (b) para $R/a = 0,25$, com número de Chern não trivial $C_{+3} = 2$ cuja banda eventualmente irá fechar o gap com o aumento de R/a ; (c) para $R/a = 0,29$, limite em que $R \rightarrow R_0$ com simetria Ξ [123].

A interação de skyrmions com a superfície de um isolante topológico leva a outros fenômenos além da quebra de simetria de reversão temporal e abertura de um gap de energia, como efeitos de skyrmions carregados com estados ligados que podem ser manipulados com campos magnéticos externos ou os próprios skyrmions que podem ser manipulados usando campos elétricos [125], já no caso em que os skyrmions da rede do modelo pudessem interagir entre si, existiriam outros fenômenos que poderiam se manifestar, tal como uma interação atrativa formando um estado ligado skyrmion-skyrmion [126]. É possível até mesmo a formação de skyrmions devido à flutuações fermiônicas em filmes finos magnéticos na superfície de um isolante topológico [127].

5 Conclusões e Perspectivas

Os estudos envolvendo isolantes topológicos bidimensionais e tridimensionais tem gerado muito interesse nos últimos anos, tanto do ponto de vista teórico, quanto experimental. Existindo muitas questões em aberto em relação a suas características e potencialidades a serem investigadas conjuntamente com desafios experimentais a serem superados, além das perspectivas de avanços em novas tecnologias, com maiores aproveitamentos nas áreas de computação e dispositivos eletrônicos.

As classificações de estados topológicos da matéria estão sendo largamente desenvolvidas e catalogadas por teóricos de todo mundo, ao qual podemos comparar semelhantemente com uma “tabela periódica” de estados topológicos; sendo a maior parte das classificações obtidas de acordo com as simetrias de Reversão Temporal, Partícula-Buraco e simetrias Bibartite. Cujos objetivos principais consistem na predição de novos materiais que comportem tais estados topológicos, além da compreensão e previsão teórica dos efeitos gerados pelos materiais de ordem topológica, incluindo efeitos de interação e desordem^[2].

Dada as existentes limitações experimentais para produção de materiais de ordem topológica em temperatura ambiente e com grau suficiente de pureza, ainda é difícil imaginar aplicações breves, porém evidencia a possibilidade de um novo campo de estudo e desenvolvimento de novas técnicas experimentais que possam tornar possível sua utilização em larga aplicação. Existe grande aplicação futura em dispositivos eletrônicos no caso dos isolantes topológicos, devido a condução de correntes de spins polarizada que pode ser explorada em relação ao fato ter mais um grau de liberdade que um condutor trivial, também podendo se explorar a sua propriedade do transporte de cargas sem dissipação de energia em sua superfície ou mesmo suas propriedades de corrente de spin líquida em contraponto a sua condutividade Hall nula.

Os estudos das interações entre os isolantes topológicos tridimensionais com sistemas magnéticos, mais especificamente a interação dos estados de superfície, levou ao novo campo dos chamados isolantes topológicos magnéticos^[128], correspondendo a todo isolante topológico que seja dopado com elementos metálicos e magnéticos ao ponto de induzir uma magnetização que interage com os estados de superfície abrindo um gap de massa no ponto de Dirac. Tal heteroestrutura permite a observação do efeito magneto-elétrico topológico, assim como também é possível obter conduções quirais de borda associadas à uma corrente Hall semi-inteira produzida por paredes de domínio, sendo também possível transformar esses estados de borda em modos de Majorana por meio do acoplamento com um supercondutor.

Tais modos de Majorana são de grande interesse devido a possibilidade em desenvolver uma forma de produzir e detectar Férmions de Majorana, não somente com intuito do estudo

de partículas elementares mas também devido a sua direta aplicação na computação. Os Férmions de Majorana são partículas que satisfazem a equação de Dirac cuja sua antipartícula é ela própria, sendo que até hoje essa partícula nunca foi encontrada livre na natureza. Na física de matéria condensada os Férmions de Majorana como uma pseudopartícula são previstos para existir em uma interface entre um isolante topológico e um supercondutor devido a efeitos de proximidade. Com um futuro desenvolvimento para utilização dessas partículas para transporte de informações, seria possível desenvolver uma computação quântica excepcionalmente estável e praticamente imune à influências externas^[35].

Com o desenvolvimento da tecnologia de materiais e engenharia, espera-se futuramente obter uma corrente Hall semi-inteira em altas temperaturas ($> 300K$) com a possibilidade do controle desses estados usando campos externos, estados topológicos da matéria ou da interação com sistemas magnéticos, tais como impurezas, vórtices, skyrmions, ferromagnetos e paredes de domínio. Considerando também que a relação de condução do spin e momento sempre perpendiculares entre si e limitados as superfície do isolante topológico magnético levam a funcionalidades versáteis aplicadas à spintrônica, tal como uma geração eficiente de torque de transferência de spin como resultado da interação das cargas com os spins polarizados^[128]. Os isolantes topológicos magnéticos podem ser usados também para transístores magneto-elétricos, que diferente dos transístores usuais que usam uma corrente de eletricidade para produzir os bits 0 e 1, utiliza campos magnéticos ou elétricos para modificar os estados correspondentes aos bits 0 e 1 com uma maior economia de energia podendo ser controlados por cabeças de escrita menores, permitindo o armazenamento de dados de maior densidade e com potencial de avanço tecnológico comparável ao surgimento dos atuais discos rígidos, tendo a vantagem de não ter dissipação de calor por efeito Joule e maior velocidade de processamento de dados.

As perspectivas nesse trabalho consistem em aprofundar nos casos da interação dos estados de superfície do isolante topológico magnético com sistemas magnéticos, descrevendo características dos estados de superfície, da densidade local de estados, da dispersão dos níveis de Landau, das simetrias contidas no problema e se o sistema apresentará um gap de energia nos estados de borda. Tendo também o intuito de um estudo analítico em que se considera alguns casos dinâmicos da interação e do comportamento da corrente elétrica na heteroestrutura, incluindo como se comporta a resposta magneto-elétrica topológica e como estados de superfície irão se modificar no caso dinâmico do movimento de alguns sistemas magnéticos tais como vórtices, skyrmions e magnons. Tendo a área de pesquisa dos isolantes topológicos magnéticos uma ampla diversidade de casos para estudo ainda em aberto e a expectativa de que tais materiais gerem implicações em futuras aplicações tecnológicas para computação quântica, magnônica, fotônica e spintrônica, para geração de tecnologia e

dispositivos.

Referências

- [1] J. MACIEJKO, T. L. HUGHES AND S.-C. ZHANG; Annual Review of Condensed Matter Physics **2**, 31-53 (2011);
- [2] X.-L. QI AND S.-C. ZHANG; Reviews of Modern Physics **83**, 1057 (2011);
- [3] C. L. KANE AND E. J. MELE; Physical Review Letters **95**:226801 (2005);
- [4] B. A. BERNEVIG, T. L. HUGHES AND S. C. ZHANG; Science **314**, 1757 (2006);
- [5] M. KÖNIG ET AL; Science **318**, 766 (2007);
- [6] J.M. FONSECA, W.A. MOURA-MELO AND A.R. PEREIRA; The European Physical Journal B **86**: 481 (2013);
- [7] XIAO-LIANG QI ET AL; Nature Physics **4**: 273-276 (2008);
- [8] E. H. HALL; American Journal of Mathematics **2**, 287 (1879);
- [9] YOUNG E FREEDMAN; “*FÍSICA III: eletromagnetismo, 12th ed.*”, Editora Addison Wesley, São Paulo, SP, Brasil, 2009;
- [10] L. SCHUBNIKOW AND W. J. DE HAAS; Royal Netherlands Academy of Arts and Science **33**, 363-378 (1930);
- [11] L. D. LANDAU; Diamagnetismus der Metalle. Z. Physik **64**, 629-637 (1930);
- [12] W.J. DE HAAS AND P.M. VAN ALPHEN; Proceedings of the Academy of Sciences Amsterdam **33**, 1106-1118 (1930);
- [13] K. V. KLITZING ET AL; Physical Review Letters **45**, 494-97 (1980);
- [14] B. JECKELMANN AND B. JEANNERET; Reports on Progress in Physics **64**, 1603-1655 (2001);
- [15] ZYUN FRANCIS EZAWA; “*Quantum Hall effects: field theoretical approach and related topics, 2th ed.*”, World Scientific, Toh Tuck Link, Singapore, 2008;
- [16] L. D. LANDAU; Physical Review **60**, 356 (1941);
- [17] NOBELPRIZE.ORG; “*The Nobel Prize in Physics 1962*”, accessed 18 April 2021, <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1962/summary/>>;
- [18] L. D. LANDAU; Soviet Physics JETP **3**, V-6, 920 (1957);
- [19] L. D. LANDAU; Ukrainian Journal of Physics **53**, Special Issue 25-35 (2008); Originally published in ZhETF USSR **7**, 19-32 (1937);

- [20] V.L. GINZBURG AND L. D. LANDAU; “*On the Theory of Superconductivity. In: On Superconductivity and Superfluidity.*” Springer, Berlin, Heidelberg, 2009; Originally published in ZhETF USSR **20**, 1064-1082 (1950);
- [21] NICHOLAS R. PONIATOWSKI; American Journal of Physics **87**, 436 (2019);
- [22] MARTIN GREITER; Annals of Physics **319**, 217-249 (2005);
- [23] PIERS COLEMAN; “*Introduction to many body physics, 1st ed.*”, Cambridge University Press, United Kingdom, 2015;
- [24] JOHN MICHAEL KOSTERLITZ; Reviews of Modern Physics **89**, 040501 (2017);
- [25] F. DUNCAN M. HALDANE; Reviews of Modern Physics **89**, 040502 (2017);
- [26] NOBELPRIZE.ORG; “*The Nobel Prize in Physics 2016*”, accessed 18 April 2021, <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2016/summary/>>;
- [27] JOSEPH E. AVRON ET AL; Physics Today **56**, 8, 38 (2003);
- [28] NOBELPRIZE.ORG; “*The Nobel Prize in Physics 2010*”, accessed 18 April 2021, <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/summary/>>;
- [29] KONSTANTIN NOVOSELOV ET AL; Science **306**: 5696 (2004);
- [30] J. M. KOSTERLITZ AND D. J. THOULESS; Journal of Physics C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973);
- [31] P. M. CHAIKIN AND T. C. LUBENSKY; “*Principles of Condensed Matter Physics*”, Editora Cambridge University Press, Reino Unido, 1995;
- [32] DONG-HYUN KIM ET AL; Nature Materials **9**, 165-171 (2010);
- [33] KEITH BURNS AND MARIAN GIDEA; “*Differential Geometry and Topology: With a View to Dynamical Systems;*” Chapman and Hall/CRC, 2005;
- [34] JAN SEIDEL; “*Topological Structures in Ferroic Materials: Domain Walls, Vortices and Skyrmions;*” Springer, 2016;
- [35] M.Z. HASAN, AND C. L. KANE; Reviews of Modern Physics **82**, 3045 (2010);
- [36] D. J. THOULESS ET AL; Physical Review Letters **49**, 405-408 (1982);
- [37] MICHAEL VICTOR BERRY; Proceedings of the Royal Society A **392**, 45-57 (1984);
- [38] MATTHEW BEACH; “*Machine Learning Topological defects in the XY Model*”, < PHYSICS | MACHINE LEARNING > 2018, accessed 27 March 2021, <<https://physicsml.github.io/blog/ML-in-XY>>;

- [39] DAVID J. THOULESS; “*Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*,” World Scientific Publishing Company, 1998;
- [40] JEFFREY C. Y. TEO AND C. L. KANE; *Physical Review B* **82**: 115120 (2010);
- [41] KLAUS VON KLITZING; *Philosophical Transactions of the Royal Society A* **363**: 2203 (2005);
- [42] MAHITO KOHMOTO; *Annals of Physics* **160**, 343-354 (1985);
- [43] D. J. THOULESS; *International Journal of Modern Physics B* **11**:28, 3319-3327 (1997);
- [44] NOBELPRIZE.ORG; “*The Nobel Prize in Physics 1985*”, accessed 18 April 2021, <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1985/summary/>>;
- [45] D.C. TSUI, H.L.STÖRMER AND A.C. GOSSARD; *Physical Review Letters* **48**:1559-62 (1982);
- [46] DANIEL CHEE TSUI ET AL; *Physica B+C* **117-118**:2, 688-690 (1983);
- [47] ROBERT BETTS LAUGHLIN; *Physical Review Letters* **50**:1395 (1983);
- [48] NOBELPRIZE.ORG; “*The Nobel Prize in Physics 1998*”, accessed 18 April 2021, <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1998/summary/>>;
- [49] X.-L. QI AND S.-C. ZHANG; *Physics Today* **63**, 1, 33 (2010);
- [50] DAVID GRIFFITHS; “*MECÂNICA QUANTICA, 2^a ed.*”, Editora Pearson Prentice Hall, São Paulo, SP, Brasil, 2011;
- [51] MARCEL FRANZ AND LAURENS MOLENKAMP; “*Topological Insulators, Vol.6*”, Elsevier, Oxford, United Kingdom, 2013;
- [52] JOSEPH MACIEJKO ET AL; *Annual Review of Condensed Matter Physics* **2**: 31-53 (2010);
- [53] LIANG FU AND C. L. KANE; *Physical Review B* **74**: 195312 (2006);
- [54] LIANG FU AND C. L. KANE; *Physical Review B* **76**: 045302 (2007);
- [55] TAKAHIRO FUKUI AND YASUHIRO HATSUGAI; *Journal of the Physical Society of Japan* **76**, 5:053702 (2007);
- [56] J. E. MOORE AND L. BALENTS; *Physical Review B* **75**: 121306(R) (2007);
- [57] TAKAHIRO FUKUI ET ALL; *Journal of the Physical Society of Japan* **77**: 12:123705 (2008);
- [58] XIAO-LIANG QI ET AL; *Physical Review B* **78**: 195424 (2008);
- [59] RAHUL ROY; *Physical Review B* **79**: 195321 (2009);
- [60] ZHONG WANG ET AL; *New Journal of Physics* **12**: 065007 (2010);

- [61] D. N. SHENG ET AL; Physical Review Letters **97**: 036808 (2006);
- [62] LIANG FU ET AL; Physical Review Letters **98**: 106803 (2007);
- [63] RAHUL ROY; Physical Review B **79**: 195322 (2009);
- [64] MAHITO KOHMOTO ET AL; Physical Review B **45**: 13488 (1992);
- [65] D. HSIEH ET AL; Nature **452**: 970-974 (2008);
- [66] B.LENOIR ET AL; Journal of Physics and Chemistry of Solids **57**: 89-99 (1996);
- [67] Y. XIA ET AL; Nature Physics **5**: 398-402 (2009);
- [68] M. ZAHID HASAN AND JOEL E. MOORE; Annual Review of Condensed Matter Physics **2**: 55-78 (2011);
- [69] Y. L. CHEN ET AL; Science **329**:5992, 659-662 (2010);
- [70] W. P. SU, J. R. SCHRIEFFER AND A. J. HEEGER; Physical Review Letters **42**: 1698 (1979);
- [71] W. P. SU, J. R. SCHRIEFFER AND A. J. HEEGER; Physical Review B **22**: 2099 (1983);
- [72] E. I. BLOUNT; Solid State Physics **13**: 305-373 (1962);
- [73] J. ZAK; Physical Review Letters **62**: 2747 (1989);
- [74] R. D. KING-SMITH AND DAVID VANDERBILT; Physical Review B **47**: 1651(R) (1993);
- [75] RAFFAELE RESTA; Reviews of Modern Physics **66**: 899 (1994);
- [76] JÁNOS K. ASBÓTH ET ALL; “*A Short Course on Topological Insulators*”, Springer International Publishing Switzerland, 2016;
- [77] NAVKETAN BATRA AND GOUTAM SHEET; Resonance **25**, 765-786 (2020);
- [78] FREDERICK DUNCAN MICHAEL HALDANE; Physical Review Letters 1988 **61** 18 (2015);
- [79] A. H. DE CASTRO NETO ET AL; Reviews of Modern Physics **81**, 109 (2009);
- [80] P. R. WALLACE; Physical Review **71**, 622 (1947);
- [81] MOMCHIL MINKOV AND VINCENZO SAVONA; Optica **3**:2, 200-206 (2016);
- [82] D. P. DIVINCENZO AND E. J. MELE; Physical Review B 1988 **29**, 1685 (1984);
- [83] GORDON W. SEMENOFF; Physical Review Letters **53**, 2449 (1984);
- [84] CHAOXING LIU ET AL; Physical Review Letters **100**: 236601 (2008);

- [85] SHUICHI MURAKAMI; Physical Review Letters **97**: 236805 (2006);
- [86] MARKUS KÖNIG ET AL; Journal of the Physical Society of Japan **77**: 3:031007 (2008);
- [87] XIAO-LIANG ET AL; Physical Review B **74**: 085308 (2006);
- [88] D. J. THOULESS ET AL; Physical Review Letters **49**: 405 (1982);
- [89] CHAO-XING LIU ET AL; Physical Review B **82**: 045122 (2010);
- [90] WEI-CHENG LEE ET AL; Physical Review B **80**: 245439 (2009);
- [91] HAIJUN ZHANG ET AL; Nature Physics **5**:438-442 (2009);
- [92] CHAO-XING LIU ET AL; Physical Review B **82**: 045122 (2010);
- [93] XIAO-LIANG QI ET AL; Science **323**, 1184-1187 (2009);
- [94] ANDREW M. ESSIN, JOEL E. MOORE, AND DAVID VANDERBILT; Physical Review Letters **102**: 146805 (2009);
- [95] A. KARCH; Physical Review Letters **103**: 171601 (2009);
- [96] FRANK WILCZEK; Physical Review Letters **58**: 1799 (1987);
- [97] A. G. NIKITIN AND OKSANA KURIKSHA; Physical Review D **86**: 025010 (2012);
- [98] F. D. M. HALDANE AND LIANG CHEN; Physical Review Letters **53**: 2591 (1984);
- [99] E. WITTEN; Physics Letters B **86**: 283-287 (1979);
- [100] PIERRE CURIE; Séances de la Société Française de Physique (Paris) **p76** (1894);
- [101] PAUL ADRIEN MAURICE DIRAC; Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **133**: 821 (1931);
- [102] G. ROSENBERG, H.-M. GUO, AND M. FRANZ; Physical Review B **82**: 041104(R) (2010);
- [103] J. MACIEJKO ET AL; Physical Review Letters **105**: 246809 (2010);
- [104] G. ROSENBERG AND M. FRANZ; Physical Review B **82**: 035105 (2010);
- [105] B. SERADJEH, J. E. MOORE, AND M. FRANZ; Physical Review Letters **103**: 066402 (2009);
- [106] J. MACIEJKO ET AL; Physical Review Letters **105**: 166803 (2010);
- [107] WANG-KONG TSE AND A. H. MACDONALD; Physical Review Letters **105**: 057401 (2010);
- [108] L. OHNOUTEK ET AL; Scientific Reports **6**: 19087 (2016);

- [109] TAKEHITO YOKOYAMA ET AL; Physical Review B **81**: 121401(R) (2010);
- [110] T. YOKOYAMA, J. ZANG, AND N. NAGAOSA; Physical Review B **81**: 241410(R) (2010);
- [111] KENTARO NOMURA AND NAOTO NAGAOSA; Physical Review B **82**: 161401(R) (2010);
- [112] ION GARATE AND M. FRANZ; Physical Review Letters **104**: 146802 (2010);
- [113] O. V. YAZYEV, J. E. MOORE, AND S. G. LOUIE; Physical Review Letters **105**: 266806 (2010);
- [114] S. MONDAL ET AL; Physical Review Letters **104**: 046403 (2010);
- [115] J. B. S. MENDES ET AL; Physical Review B **96**: 180415(R) (2017);
- [116] J. B. S. MENDES ET AL; Physical Review Materials **5**: 024206 (2021);
- [117] QIN LIU ET AL; Physical Review Letters **102**:156603 (2009);
- [118] A. MATULIS AND F. M. PEETERS; Physical Review B **77**:115423 (2008);
- [119] CARMEN LYS RIBEIRO BRAGA; *“Notas de Física Matemática, 1^a ed.”*, Editora Livraria da Física, São Paulo, SP, Brasil, 2006;
- [120] MARIANA M. ODASHIMA ET AL; Revista Brasileira de Ensino de Física **39**, 1, e1303 (2017);
- [121] Z. F. WANG ET AL; Physical Review B **74**: 125417 (2006);
- [122] H. SHIBA; Physical Review B **40**: 435-451 (1968);
- [123] STEFAN DIVIC ET AL; *“Magnetic skyrmion crystal at a topological insulator surface”*, Preprint, accessed 15 November 2021, <<https://arxiv.org/abs/2103.15841v2>>;
- [124] W. KANG ET AL; Proceedings of the IEEE **104**: 10, 2040-2061 (2016);
- [125] HILARY M. HURST; Physical Review B **91**: 060401(R) (2015);
- [126] KUNAL L. TIWARI ET AL; Physical Review B **100**: 125414 (2019);
- [127] FLAVIO S. NOGUEIRA ET AL; Physical Review B **98**: 060401(R) (2018);
- [128] Y. TOKURA, K. YASUDA AND A. TSUKAZAKI; Nature Reviews Physics **1**: 126-143 (2019).