Universidade Federal da Paraíba

Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Coordenação dos Cursos de Pós-Graduação em Física

Tese de Doutorado

# Propriedades eletrônicas da matéria topológica: heteroestruturas e efeitos da rotação

Jonas Romero Fonseca de Lima

João Pessoa

-2014-

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Coordenação dos Cursos de Pós-Graduação em Física

# Propriedades eletrônicas da matéria topológica: heteroestruturas e efeitos da rotação

Jonas Romero Fonseca de Lima

Tese realizada no Departamento de Física da UFPB, sob orientação do Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes, para a obtenção do grau de Doutor de Física.

João Pessoa
-2014-

*Aos meus pais,*
*por toda a dedicação e exemplo,*
*e a minha esposa, que tem*
*me apoiado em todos os momentos.*

# *Agradecimentos*

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus por ter me dado discernimento, saúde e por ter me capacitado a realizar esse trabalho.

Também gostaria de agradecer a meus pais por todo o esforço e dedicação que me fizeram chegar até aqui.

Agradeço a minha esposa Valdênia Freitas por ter estado ao meu lado durante toda essa jornada e pelo apoio e ajuda em todos os momentos.

Agradeço a Fernando Moraes por ter me dado a oportunidade de ser seu orientando, pelas discussões, pelas orientações e pelo exemplo que quero seguir durante toda a minha carreira profissional.

Agradeço a meus amigos que contribuíram de alguma forma com esse trabalho. Em especial, agradeço a Lincoanderson, José Geilson, Adriano Sampiere, Márcio Moura e Júlio Brandão.

Por fim, gostaria de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro durante todo este período.

# *Resumo*

Nesta tese estudamos as propriedades eletrônicas de diversos sistemas físicos da matéria condensada utilizando dois modelos contínuos distintos, o modelo de massa efetiva e o hamiltoniano de Dirac efetivo. Em vários sistemas existe o aparecimento de uma massa efetiva dependente da posição. Diversos modelos para o hamiltoniano cinético com massa efetiva variável foram propostos, mas não existe uma definição de qual seja o mais adequado. Essa é uma das questões mais antigas em aberto na física do estado sólido. Nós propomos um novo modelo, levando em conta todas as permutações possíveis entre os operadores e mostramos que ele satisfaz os requisitos fundamentais da mecânica quântica. Nós usamos esse modelo para obter a estrutura de minibandas de uma heteroestrutura formada por dois materiais diferentes e comparamos o nosso modelo com outros modelos propostos anteriormente. Também obtemos a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma superfície curva com massa efetiva dependendo da posição. Seguimos a abordagem de da Costa, onde surge um potencial geométrico. Mostramos que a massa variável não altera a potencial geométrico, contribuindo apenas para a parte cinética. Nós usamos a equação obtida para estudar as propriedades de transporte eletrônico em uma junção de dois cilindros de raios diferentes, com a massa efetiva variando com o raio do cilindro. Utilizando um hamiltoniano de Dirac efetivo nós consideramos o grafeno sobre um substrato formado por uma heteroestrutura com dois materiais diferentes. Cada material induz um gap de energia e uma velocidade de Fermi específica no grafeno, fazendo com que tenhamos um hamiltoniano de Dirac com termo de gap (massa) e velocidade de Fermi dependendo da posição. Nós escrevemos esse operador levando em conta que ele tem que ser hermitiano e obtemos a estrutura de minibandas induzidas na estrutura eletrônica do grafeno pelo substrato. Motivados por resultados experimentais, nós também estudamos os efeitos da rotação na estrutura eletrônica do nanotubo de carbono, fulereno $C_{60}$ e isolante topológico, utilizando um hamiltoniano de Dirac efetivo. Para o nanotubo de carbono e o $C_{60}$ a rotação adiciona um deslocamento nos níveis de energia e há uma quebra na degenerescência de spin. No isolante topológico a rotação induz apenas um deslocamento na energia.

**Palavras Chaves:** Modelo contínuo, massa variável, heteroestrutura, rotação.

# *Abstract*

In this thesis we study the electronic properties of several systems of condensed matter physics using two different continuum models, the effective mass theory and the effective Dirac Hamiltonian. In several systems, there is an effective mass depending on position. Some models for the kinetic energy operator were proposed to describe these systems, but there is no definition of which one is the most appropriate. It is one of the oldest open questions in solid state physics. We propose a new model, where we consider all permutations among the operators and show that it satisfies the fundamental requirements of quantum mechanics. We use this model to obtain the minibands structure of a heterostructure composed by two different materials and compare our model with other models previously proposed. We also get the Schrödinger equation for a particle constrained to a curved surface with position dependent mass. We follow the da Costa approach, where there is a geometric potential. We show that the position dependent mass does not affect the geometric potential, contributing only to the kinetic part. We use this equation to study the electronic transport in a junction of two cylinders with different radii, with the effective mass varying with the cylinder radius. Using the effective Dirac Hamiltonian, we consider a graphene sheet on a periodic substrate heterostructure composed by two different materials. Each material induces a specific energy gap and Fermi velocity in the graphene, so the Dirac Hamiltonian has a gap (mass) term and a Fermi velocity depending on position. We write this operator taking into account that it has to be Hermitian and we obtain the minigaps induced by the substrate in the electronic structure of graphene. Motivated by experimental results, we study the effects of rotation on the electronic structure of carbon nanotubes, fullerene $C_{60}$ and topological insulators, using an effective Dirac operator. In the carbon nanotube and $C_{60}$ cases, the rotation adds a shift in the energy levels and a break in spin degeneracy. In the topological insulator case, the rotation adds only a shift in the energy.

**Keywords:** Continuum model, variable mass, heterostructure, rotation.

# *Sumário*

**Agradecimentos** p. i

**Resumo** p. ii

**Abstract** p. iv

**Lista de Figuras** p. viii

**Lista de Tabelas** p. x

**Introdução** p. 1

**I Massa Efetiva** **8**

**1 Teoria de Massa Efetiva** p. 9

1.1 Introdução . . . . . p. 9

1.2 Massa Efetiva em Metais e Semicondutores . . . . . p. 9

Metais . . . . . p. 9

Semicondutores . . . . . p. 14

1.3 Massa Efetiva Variável . . . . . p. 16

1.4 Conclusões . . . . . p. 18

**2 Novo Modelo para Massa Efetiva Dependendo da Posição** p. 20

2.1 Introdução . . . . . p. 20

2.2 Nosso Modelo . . . . . p. 20

2.3 Estrutura de Bandas para uma Heteroestrutura . . . . . p. 21
2.4 Conclusões . . . . . p. 27

**3 Partícula Confinada a uma Superfície Curva com Massa Efetiva Variável** p. 29
3.1 Introdução . . . . . p. 29
3.2 O Hamiltoniano . . . . . p. 29
3.2.1 Transmissão em Junções Cilíndricas . . . . . p. 32
3.3 Conclusões . . . . . p. 34

**II Hamiltoniano de Dirac Efetivo 36**

**4 Equação de Dirac Efetiva** p. 37
4.1 Introdução . . . . . p. 37
4.2 Equação de Dirac . . . . . p. 37
4.3 Grafeno . . . . . p. 42
4.4 Isolantes Topológicos . . . . . p. 47
4.5 Conclusões . . . . . p. 54

**5 Equação de Dirac Efetiva com Termo de Massa Variável** p. 55
5.1 Introdução . . . . . p. 55
5.2 O Modelo . . . . . p. 56
5.3 Grafeno em uma heteroestrutura de substrato . . . . . p. 57
5.4 Conclusões . . . . . p. 62

**III Rotação em materiais topológicos 65**

**6 Dinâmica em um referencial girante** p. 66
6.1 Introdução . . . . . p. 66

6.2 A Hamiltoniana de uma partícula clássica . . . . . p. 66
6.3 O Hamiltoniano para uma partícula quântica . . . . . p. 68
6.4 O Hamiltoniano de Dirac Relativístico . . . . . p. 70
6.5 Conclusões . . . . . p. 72

**7 Nanotubo de Carbono Girante** p. 73
7.1 Introdução . . . . . p. 73
7.2 Espectro de energia para o nanotubo girante . . . . . p. 74
7.3 Conclusões . . . . . p. 75

**8 Fulereno girante na presença de campo magnético** p. 76
8.1 Introdução . . . . . p. 76
8.2 O Modelo Contínuo para o Fulereno Girante . . . . . p. 77
8.3 Estrutura Eletrônica . . . . . p. 83
8.4 Conclusões . . . . . p. 88

**9 Isolante Topológico Girante** p. 90
9.1 Introdução . . . . . p. 90
9.2 Espectro de energia para um isolante topológico esférico girante . . . . p. 90
9.3 Conclusões . . . . . p. 94

**Conclusões e Perspectivas** p. 95

**Referências Bibliográficas** p. 99

**Referências Bibliográficas** p. 99

# *Lista de Figuras*


1 Quatro alótropos do carbono. . . . . p. 3

2 Uma heteroestrutura periódica. . . . . p. 21

3 A interface entre os dois materiais. . . . . p. 22

4 Minibanda na primeira zona de Brillouin. . . . . p. 25

5 Energia de bandas na primeira zona de Brillouin. . . . . p. 27

6 Junção entre dois cilindros de raios diferentes. . . . . p. 32

7 Os valores permitidos e proibidos de $E$ para partículas livres . . . . . p. 43

8 Estrutura hexagonal do grafeno e a zona de Brillouin. . . . . p. 43

9 Dispersão eletrônica do grafeno. . . . . p. 45

10 Estado isolante da matéria. . . . . p. 48

11 Interface entre um estado Hall quântico e um isolante convencional. . . p. 50

12 Dispersão eletrônica na região entre dois pontos da borda. . . . . p. 51

13 Estados da borda de um isolante Hall quântico de spin. . . . . p. 52

14 A heteroestrutura periódica de substrato. . . . . p. 58

15 Uma interface no grafeno. . . . . p. 58

16 A banda de condução dos materiais na heteroestrutura . . . . . p. 61

17 O primeiro minigap. Caso 1. . . . . p. 62

18 O primeiro minigap. Caso 2. . . . . p. 63

19 O primeiro minigap. Caso 3. . . . . p. 63

20 Nanotubo de carbono com borda zig-zag. . . . . p. 73

21 Fulereno $C_{60}$ . . . . . p. 76

22 Corte de uma seção angular de $\pi/3$ de uma folha de grafeno. . . . . p. 78

23 Gráfico do espectro de energia (9.18) em função de $j$. . . . . p. 93

24 Gráfico do espectro de energia (9.18) em função da rotação $\Omega$. . . . . p. 94

# *Lista de Tabelas*

1 Massa efetiva para vários metais. . . . . p. 14

# *Introdução*

A Física da Matéria Condensada (FMC) é a área da física que estuda as propriedades físicas dos sólidos e líquidos, que são estados da matéria onde os átomos constituintes estão perto o suficiente uns dos outros de modo que cada átomo interaja simultaneamente com muitos vizinhos. Esses estados constituem o que é chamado de estado condensado da matéria. A FMC é de grande importância por dois principais motivos. O primeiro é que ela fornece a estrutura quântica-mecânica para a hidrodinâmica, termodinâmica, eletrônica, ótica e estado sólido. O segundo é a sua grande contribuição para o avanço na tecnologia.

Nesta tese vamos estudar as propriedades eletrônicas de alguns sistemas físicos da matéria condensada, todos no estado sólido, usando modelos contínuos. Existem várias teorias para se estudar as propriedades eletrônicas de sólidos, e podemos dividir em três grupos. O primeiro inclui métodos empíricos, como o modelo de ligação forte (*tight-binding*). O segundo é o método *ab initio*, onde é feito uma análise numérica a partir de primeiros princípios. O terceiro grupo é o modelo contínuo. No modelo contínuo a estrutura da rede desaparece e os portadores de carga são descritos como partículas livres.

O modelo contínuo tradicional da FMC é a teoria de massa efetiva. Esse modelo foi introduzido nas referências [1, 2, 3], onde ele teve bastante sucesso ao descrever a formação de níveis de energia rasos devido a impurezas em cristais. Após isso, a teoria de massa efetiva teve um grande avanço com os trabalhos descritos nas referências [4, 5, 6]. Esse modelo é bastante útil para descrever elétrons e buracos em metais e semicondutores. Nos metais, os portadores de carga são descritos como partículas livres e a informação de suas interações com o material estão contidas na massa. Já em um semicondutor, se define que toda a curvatura da relação de dispersão dos estados eletrônicos é determinada pela massa, que agora passa a ser uma massa efetiva.

Em diferentes sistemas físicos é natural o aparecimento de uma massa efetiva dependendo da posição, como por exemplo em heterojunções [7, 8], poços quânticos [9, 10] e super-redes [11, 12]. Quando a massa depende da posição ela passa a ser um operador que não comuta com o operador momento linear. Dessa forma, o operador de energia cinética

usual $p^2/2m$ deixa de ser hermitiano. Diferentes propostas foram feitas na tentativa de se obter um operador de energia cinética com massa variável. A primeira delas foi feita em 1966 [13], onde se buscava preservar a conservação de corrente em uma junção de dois materiais diferentes, e até hoje ainda não existe uma definição de qual seja o hamiltoniano cinético mais adequado para descrever esses sistemas.

Nesta Tese de Doutorado, dentro da teoria de massa efetiva, é proposto um novo modelo para o operador de energia cinética com massa dependendo da posição. Este modelo considera todas as permutações possíveis entre os operadores, tornando o hamiltoniano um operador hermitiano. Esse novo modelo proposto é utilizado para encontrar as minibandas e minigaps de uma heteroestrutura periódica formada por dois materiais diferentes, onde em cada um deles os portadores de carga tem uma massa efetiva diferente. O mesmo sistema também é estudado usando outros modelos e os resultados são comparados.

Um ramo da física da matéria condensada muito importante e interessante é a investigação de sistemas quânticos curvos em duas dimensões. Em uma superfície curva, podemos ter a massa efetiva dependendo da posição. Nós obtemos a equação de Schrödinger para uma partícula quântica confinada a uma superfície bidimensional curva com a massa variável. É seguido a abordagem de da Costa, onde surge um potencial geométrico. Essa equação de Schrödinger é usada para descrever portadores de carga em uma junção de dois cilindros de raios diferentes, onde a massa efetiva no cilindro varia com o raio.

Outro modelo contínuo que vem sendo utilizado mais recentemente na FMC é um hamiltoniano efetivo de Dirac. A equação de Dirac descreve elétrons relativísticos, diferentes dos que são observados na matéria condensada, mas o aparecimento de uma relação de dispersão linear em alguns sistemas da FMC possibilitou o seu uso de forma efetiva. O primeiro sistema físico onde se verificou ser possível a utilização desse modelo foi em estruturas de carbono. Por causa da flexibilidade das ligações químicas, sistemas baseados em carbono mostram um enorme número de estruturas com uma vasta variedade de propriedades físicas. Entre estas estruturas podemos citar o grafite (3D), o grafeno (2D), o nanotubo de carbono(1D) e o fulereno (0D).

Dentre as estruturas mencionadas acima, o grafeno desempenha um papel importante por ser a base para o entendimento das propriedades eletrônicas dos outros alótropos. O grafeno é composto por átomos de carbono arranjados em uma estrutura hexagonal [ver Fig.(1)]. Os fulerenos são moléculas onde os átomos de carbono são arranjados esfericamente, e do ponto de vista físico, tem dimensão zero. O fulereno pode ser obtido do

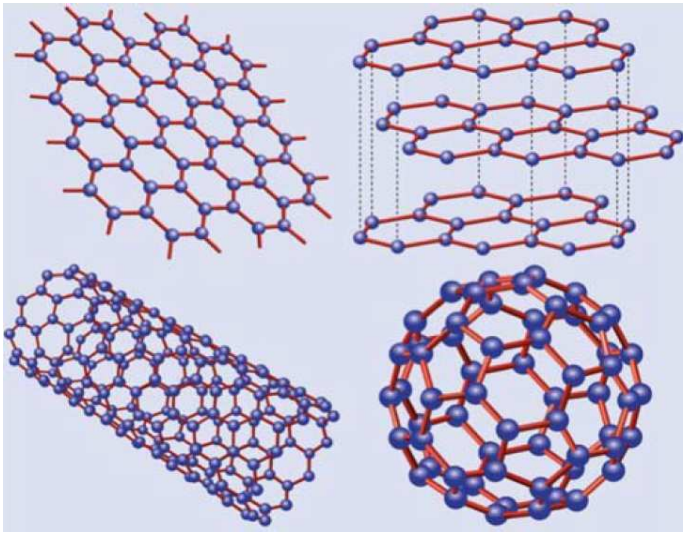

Figura 1: Quatro alótropos do carbono. Na parte de cima e na esquerda temos o grafeno, que é uma rede hexagonal de átomos de carbono em duas dimensões. Em cima, na direita, temos o grafite que pode ser visto como várias camadas de grafeno empilhadas. Na parte de baixo temos na esquerda uma folha de grafeno enrolada formando um nanotubo de carbono e na direita o fulereno ($C_{60}$), que são moléculas que podem ser obtidas introduzindo doze pentágonos na estrutura hexagonal do grafeno. (Fonte: referência [14]).

grafeno introduzindo pentágonos. Os nanotubos de carbono podem ser obtidos enrolando uma porção da folha de grafeno, formando um cilindro. Já o grafite é formado empilhando várias folhas de grafeno. Em 1947 [15], ao estudar o grafite, Wallace considerou como uma primeira aproximação desconsiderar as interações entre os planos e começou estudando o caso bidimensional, que é o grafeno. A partir de um modelo de ligação forte (*tight-binding*), ele obteve uma relação de dispersão linear $E = \pm\hbar v_F|\vec{p}|$ para estados eletrônicos de baixa energia e vetores de onda próximos do contorno da zona de Brillouin. Essa relação de dispersão é igual à obtida para férmions de Dirac relativísticos sem massa, apenas trocando a velocidade da luz $c$ pela velocidade de Fermi $v_F$. Com isso, os portadores de carga no grafeno com baixa energia podem ser descritos como férmions de Dirac sem massa.

Em 1985 o fulereno foi descoberto pelos químicos Harold Kroto, Robert Curl e Richard Smalley [16]. Kroto estudava cadeias carbônicas, as Poliinas, e por meio de radioastronomia, estas moléculas estavam sendo detectadas no espaço. Com a intenção de reproduzir as condições estrelares para a síntese dessas moléculas, Kroto e colaboradores desenvolveram uma técnica em que um laser vaporizava átomos de um material refratário. Eles vaporizaram o carbono e sintetizaram a Poliina que Kroto já havia estudado nas observações de astronomia, mas além dela, eles observaram outra molécula muito intrigante. A molécula tinha 60 átomos de carbono e uma estrutura esférica. Em homenagem ao

arquiteto americano Richard Buckminster Fuller, eles chamaram essa molécula de **buckminsterfulereno**. Em 1996, eles ganharam o Prêmio Nobel de Química pela descoberta dos Fulerenos.

O modelo contínuo para o fulereno foi proposto em 1992 [17, 18]. O fulereno possui doze pentágonos em sua estrutura e no modelo contínuo, cada pentágono é descrito por dois campos de calibre. Um dos fluxos é devido à invariância de rotação no espaço recíproco e o outro é devido às desclinações necessárias para introduzir um pentágono em uma folha de grafeno. Todos os fluxos são substituídos por um monopolo magnético efetivo no centro do fulereno, de modo que o fluxo gerado pelo monopolo é o mesmo dado pela soma dos fluxos individuais devido aos pentágonos.

Uma das características mais interessantes das moléculas $C_{60}$ é que elas giram no estado sólido [19, 20]. Embora a rotação seja muito importante para a determinação das propriedades físicas do $C_{60}$, poucos trabalhos [21, 22] foram publicados estudando sua influência nas propriedades eletrônicas da molécula. Nós estudamos os efeitos da rotação no espectro de energia do fulereno $C_{60}$ utilizando o modelo contínuo. A rotação é incorporada no hamiltoniano de Dirac pelo acoplamento entre a rotação e o momento angular total, que é a soma do momento angular orbital com o de spin. Nós também adicionamos um campo magnético uniforme na mesma direção do eixo de rotação.

Os nanotubos de carbono foram descobertos em 1991 por Iijima [23], que obteve nanotubos de paredes múltiplas variando de 2 a 50. No ano seguinte, três grupos teóricos estudaram as propriedades eletrônicas do nanotubo de parede simples [24, 25, 26]. Apenas em 1993, dois grupos experimentais encontraram o nanotubo de carbono de parede simples [27, 28]. Após esses trabalhos, muitos estudos foram feitos e propriedades interessantes foram descobertas nos nanotubos de carbono, fazendo com que eles tenham aplicações em diferentes áreas como nanotecnologia, eletrônica, óptica e outros campos da ciência dos materiais e tecnologia.

Em 1997 [29] foi proposto um modelo contínuo para descrever estados eletrônicos de baixa energia em nanotubos de carbono metálicos. Esse modelo consiste em escrever o hamiltoniano efetivo de Dirac para o grafeno em coordenadas cilíndricas e adicionar dois potenciais vetores. Um para levar em conta o fato de termos condições periódicas de contorno na direção $\phi$ e o outro para levar em conta as flutuações nas amplitudes dos saltos para vizinhos mais próximos devido à curvatura. Um modelo contínuo mais simples foi usado com sucesso na referência [30], onde o hamiltoniano efetivo de Dirac para o grafeno foi escrito em coordenadas cilíndricas e foi imposta uma condição de contorno

periódica na direção circunferencial, sem a introdução de fluxos.

Em 2002, Král e Sadeghpour [31] mostraram que luz polarizada pode induzir uma rotação com frequências de GHz em nanotubos. Neste método, o momento angular de fótons infravermelhos são transferidos para os fônons do nanotubo induzindo uma rotação muito rápida. Motivados por esse resultado, nós investigamos os efeitos da rotação na estrutura eletrônica do nanotubo de carbono. Para isso, nós utilizamos o modelo contínuo que foi usado na referência [30], no qual não existe a presença dos potenciais vetores.

Embora o grafeno seja o protótipo de todos os alótropos do carbono citados acima, ele só foi isolado no ano de 2004 [32]. Essa demora se deve ao fato de que por muito tempo acreditava-se que cristal eminentemente bidimensional seria termodinamicamente instável. Porém a descoberta do grafeno em 2004 mostrou que cristais bidimensionais existem e são estáveis em condições ambientes. Pela descoberta do grafeno e por contribuições no desenvolvimento de técnicas para a obtenção de cristais bidimensionais, Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov ganharam o Prêmio Nobel de Física de 2010.

É bem conhecido que as propriedades eletrônicas do grafeno dependem do seu substrato. Por exemplo, um substrato de nitreto de boro hexagonal ($h$-BN) leva ao aparecimento de um *gap* de 53 meV na estrutura eletrônica do grafeno [33]. O crescimento epitaxial do grafeno em um substrato de SiC produz um *gap* de $\approx$ 0,26 eV [34]. Outras propriedades eletrônicas importante do grafeno que depende do substrato são a velocidade de Fermi e a mobilidade eletrônica. Os resultados dos valores da velocidade de Fermi no grafeno em diferentes substratos podem ser encontrados na referência [35]. Utilizando o operador de Dirac efetivo, nós estudamos a estrutura eletrônica do grafeno em uma heteroestrutura periódica de substratos composta por dois materiais diferentes. Desta forma, cada material no substrato irá induzir um *gap* e uma velocidade de Fermi, fazendo com que tenhamos um *gap* e uma velocidade de Fermi dependentes da posição. Nós escrevemos o operador de Dirac efetivo para esse sistema e obtemos as minibandas e minigaps para uma heteroestrutura de substrato formada por $h$-BN e SiC.

Outro material que tem chamado bastante atenção nos últimos anos é o isolante topológico. Na FMC, por muitos anos todos os estados da matéria conhecidos eram muito bem definidos pelo princípio de quebra espontânea de simetria introduzida por Landau, onde cada fase da matéria era definida pelas simetrias nela existentes. Dessa forma, uma mudança no estado da matéria implica em uma mudança na simetria. Por exemplo, a cristalização da água em gelo quebra a simetria translacional, o ordenamento magnético dos spins quebra a simetria de rotação e a fase supercondutora quebra a simetria de

calibre. A teoria de quebra espontânea de simetria descreve diversas fases da matéria, como sólida, ferromagnética, supercondutora, entre outras. Mas em 1980, um novo estado da matéria foi descoberto [36], o Estado Hall Quântico Inteiro (EHQI), que não pode ser distinto dos outros estados utilizando o princípio introduzido por Landau, o que levou a uma nova classificação dos estados da matéria baseado na noção de ordem topológica.

O EHQI ocorre quando temos elétrons confinados em duas dimensões na presença de um campo magnético forte perpendicular ao plano de movimento. O interior da amostra é isolante, pois os elétrons de movimentam em órbitas de cíclotron circulares localizadas, mas existe uma corrente na periferia do material. Essa corrente flui em apenas uma direção sem existir dissipação. Na referência [37] foi mostrado que existe um invariante topológico, que é conhecido como invariante TKNN, que distingue um isolante convencional do EHQI. A ideia de invariante topológico fica bem clara quando olhamos para uma superfície bidimensional. Para superfícies fechadas (sem bordas), o teorema de Gauss-Bonnet nos diz que a integral da curvatura gaussiana é um invariante topológico quantizado, e esta relacionado com o genos $g$. O genos conta o "número de buracos na superfície" e é invariante sobre deformações suaves da superfície, onde suave significa qualquer deformação que não rasgue a superfície. A classificação topológica de estados da matéria distingue estados com *gap* em sua estrutura eletrônica. Teremos dois estados topologicamente equivalentes se os parâmetros do hamiltoniano de um podem ser mudados de forma suave até obter o hamiltoniano do outro, sendo que suave aqui significa sem fechar o *gap*.

Os Isolantes Topológicos (IT) são novos estados topológicos da matéria. Eles são caracterizados por uma forte interação spin-órbita e a presença da simetria de reversão temporal, existindo em duas e em três dimensões. O primeiro IT bidimensional obtido experimentalmente foi em poços quânticos de $HgTe$ intercalado entre $CdTe$ [38]. Em 2006 três grupos teóricos independentes propuseram que os IT bidimensionais podem ser generalizados para três dimensões [39, 40, 41]. A confirmação experimental veio em 2008 [42]. Nos IT, temos o *bulk* isolante e os estados na borda ou superfície podem ser vistos como duas cópias do EHQI, onde estados com spin opostos se propagam em sentidos contrários na periferia do material. Esses estados na borda não podem ser localizados, nem na presença de desordem forte, contanto que a impureza não quebre a simetria de reversão temporal. Diversas formulações matemáticas para o invariante topológico que distingue os IT de um isolante convencional podem ser encontradas nas referências [43, 44, 45, 46]. Uma característica importante nos IT tridimensionais é que os estados de superfície podem ser descritos por um hamiltoniano de Dirac efetivo, tal como acontece

para estados de baixa energia no grafeno.

Muitos trabalhos tem sugerido a existência de uma analogia entre rotação e campos eletromagnéticos. Na referência [47] foram estudados os efeitos de um campo magnético aplicado em um IT esférico. Motivados por isso, estudamos os efeitos da rotação nos estados da superfície de um IT esférico, utilizando o hamiltoniano de Dirac efetivo, e comparamos com o resultado obtido apenas com campo magnético.

A Tese está organizada em nove capítulos, sendo esses separados em três partes. Na Parte 1 nós temos três capítulos, todos relacionados com a teoria de massa efetiva. No capítulo 1 revisamos a teoria de massa efetiva em metais e semicondutores e também separamos uma seção para discutir os modelos já propostos para operadores de energia cinética com massa efetiva dependendo da posição. No capítulo 2 introduzimos o nosso novo modelo para o hamiltoniano com massa variável e o utilizamos para obter a estrutura de minibandas para uma heteroestrutura periódica. Já no capítulo 3 obtemos a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma superfície curva com massa efetiva variável e usamos essa equação para estudar as propriedades eletrônicas de uma junção cilíndrica. A Parte 2 está dividida em dois capítulos, onde usamos agora o modelo contínuo baseado em um hamiltoniano de Dirac efetivo. No capítulo 4 revisamos a equação de Dirac e mostramos como ela pode ser usada de forma efetiva para descrever portadores de carga no grafeno e em isolantes topológicos. No capítulo 5 usamos o modelo contínuo para obter a estrutura eletrônica do grafeno com o termo de *gap* e a velocidade de Fermi dependentes da posição devido a uma heteroestrutura periódica de substrato. Na Parte 3 está o nosso estudo envolvendo rotação, e ele está dividido em quatro capítulos. No capítulo 6 estudamos uma partícula clássica, quântica e relativística em um referencial girante, e obtemos como a rotação deve ser incorporada em cada situação. Nos capítulos 7, 8 e 9 investigamos o efeito da rotação na estrutura eletrônica do nanotubo de carbono, fulereno e isolante topológico, respectivamente. Nós finalizamos com uma conclusão geral de tudo que foi estudado e com as perspectivas e possíveis aplicações dos resultados obtidos.

# *Parte I*

# *Massa Efetiva*

# 1 Teoria de Massa Efetiva

## 1.1 Introdução

A teoria de massa efetiva é um modelo contínuo tradicional desenvolvido na física da matéria condensada. Ela é bastante útil para a descrição de portadores de carga em estruturas periódicas. Por exemplo, se doparmos um cristal semicondutor com um átomo que tenha uma valência inferior à requerida pela rede, estaremos gerando um "buraco". Esse buraco funciona como uma partícula positiva que também irá contribuir para a corrente elétrica. Apesar desse buraco ter a massa real nula (literalmente é um buraco, a falta de um elétron), ele irá responder a campos externos como se fosse uma partícula com massa e carga reais. Para explicar tudo isso temos a teoria de massa efetiva, onde os portadores de carga (elétrons e buracos) são descritos como se tivessem uma massa efetiva diferente da sua massa real. A massa efetiva vai depender das interações que os portadores de carga estão sujeitos na estrutura cristalina.

Neste capítulo vamos estudar a teoria de massa efetiva para dois sistemas específicos, os metais e os semicondutores. Nos metais, os portadores de carga são descritos como partículas livres e a informação de suas interações com o material estão contidas na massa. Já em um semicondutor, se define que toda a curvatura da relação de dispersão dos estados eletrônicos é determinada pela massa, que agora passa a ser uma massa efetiva.

## 1.2 Massa Efetiva em Metais e Semicondutores

### Metais

Os metais são caracterizados por possuírem uma boa condução elétrica e térmica. Outras propriedades que distinguem os metais de outros materiais são a maleabilidade, ductibilidade e o brilho. A condutividade elétrica nos metais se dá pelos elétrons de condução, e são eles também os responsáveis por grande parte do transporte térmico. Em

um metal sólido, os elétrons de valência se desprendem dos átomos e tem a mobilidade de percorrer todo o sólido e por essa razão, eles são chamados de elétrons de condução.

Um sólido metálico possui íons positivos localizados, que formam a estrutura da rede, e elétrons de condução não localizados. Os íons positivos não estão parados e vibram em torno de suas posições de equilíbrio. A quantização desses modos vibracionais dão origem aos fônons. Portanto, em um sólido metálico temos quatro tipos de interações: elétrons-fônons, fônons-fônons, elétrons-elétrons e entre elétrons e os íons estáticos.

Um modelo simples para um sólido metálico consiste em desprezarmos a interação entre elétrons e fônons. Desta forma, teremos um sólido metálico fracamente interagente constituído de dois sistemas, um apenas com fônons e outro formado apenas por elétrons. Neste modelo, podemos estudar os fônons e os elétrons separadamente. A capacidade térmica do sólido metálico, por exemplo, será dada pela soma da capacidade térmica devida aos fônons com aquela devida aos elétrons.

Muitas das propriedades eletrônicas dos metais podem ser compreendidas em termos de um modelo de elétrons livres. Nesse modelo, os elétrons de condução se movem livremente no metal e as interações descritas acima são desconsideradas. Isso se justifica pois colisões entre elétrons em um metal ocorrem com pouca frequência. Isso se deve ao princípio de exclusão de Pauli. Após uma colisão, o elétron deve ocupar orbitais que estejam desocupados. Essa restrição juntamente com a conservação de energia reduz drasticamente a possibilidade de ocorrência de orbitais não ocupados que permitam as colisões. Portanto, quando falamos em gás de elétrons livres, estamos nos referindo a um gás de elétrons livres sujeito ao princípio de exclusão de Pauli.

Para entendermos o significado físico da massa efetiva em metais vamos considerar um gás de elétrons livres em três dimensões. A equação de Schrödinger para esse sistema é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_k = E_k\psi_k \ . \tag{1.1}$$

É conveniente introduzir funções de onda que satisfaçam condições de contorno periódicas. Queremos funções de onda periódicas em $x$, $y$ e $z$ com período $L$, tal que

$$\psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z) \ , \tag{1.2}$$

da mesma forma para as coordenadas $y$ e $z$. Funções de onda que satisfazem à equação de Schrödinger para partícula livre com condições periódicas de contorno são da forma

de ondas planas

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \, , \tag{1.3}$$

onde cada componente do vetor de onda $\vec{k}$ satisfaz

$$k_i = 0 \, ; \pm\frac{2\pi}{L} \, ; \pm\frac{4\pi}{L} \, ; ... \tag{1.4}$$

Substituindo a função de onda plana na equação de Schrödinger nós temos que a energia do estado com vetor de onda $\vec{k}$ é dado por

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \, . \tag{1.5}$$

Esta expressão é chamada de relação de dispersão.

Cada vetor de onda representa um ponto dentro de uma esfera no espaço $\vec{k}$. A energia na superfície dessa esfera é chamada de energia de Fermi e os vetores de onda na superfície de Fermi têm magnitude $k_F$ tal que

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \, . \tag{1.6}$$

Para sabermos o número de estados $N$ entre zero e a energia de Fermi $E_F$, precisamos calcular o número de vetores de onda tais que

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \leq E_F \tag{1.7}$$

e multiplicar por dois, pois cada vetor de onda corresponde a dois estados com spin opostos. Podemos observar que existe um vetor de onda permitido para cada elemento de volume $(2\pi/L)^3$ no espaço $\vec{k}$. O número de estados $N$ será dado por duas vezes o número de elementos de volume dentro da esfera de raio $\sqrt{2mE_F/\hbar^2}$, portanto

$$N = 2\frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} \, . \tag{1.8}$$

A velocidade de Fermi $v_F$, que é a velocidade de uma partícula com a energia de Fermi, será dada por

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \, . \tag{1.9}$$

O número de estados por unidade de energia é chamado de densidade de estados e é dado por

$$D(E) \equiv \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2} \, . \tag{1.10}$$

Olhando para (1.8) podemos escrever

$$D(E) = \frac{3N}{2E} \, . \tag{1.11}$$

A massa efetiva em um metal está relacionada com sua capacidade térmica. Nós vamos agora obter uma expressão para a capacidade térmica eletrônica válida para baixas temperaturas $k_B T \ll E_F$, onde $k_B$ é a constante de Boltzmann. Para isso vamos considerar o aumento na energia total $\Delta U \equiv U(T) - U(0)$ de um sistema de $N$ elétrons quando ele é aquecido de 0 a $T$, que é

$$\Delta U = \int_0^\infty ED(E)f(E)dE - \int_0^{E_F} ED(E)dE \, . \tag{1.12}$$

Aqui, $f(E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac

$$f(E,T,\mu) = \frac{1}{\exp[(E-\mu)/k_B T + 1]} \, . \tag{1.13}$$

Multiplicando a identidade

$$N = \int_0^\infty D(E)f(E)dE = \int_0^{E_F} D(E)dE \tag{1.14}$$

por $E_F$, nós obtemos

$$\left( \int_0^{E_F} + \int_{E_F}^\infty \right) E_F f(E) D(E) dE = \int_0^{E_F} E_F D(E) dE \, . \tag{1.15}$$

Usando (1.15), podemos reescrever (1.12) como

$$\Delta U = \int_{E_F}^\infty (E - E_F) f(E) D(E) dE + \int_0^{E_F} (E_F - E)(1 - f(E)) D(E) dE \, . \tag{1.16}$$

A primeira integral acima dá a energia necessária para levar um elétron com $E_F$ para um estado com energia $E < E_F$, e a segunda integral dá a energia necessária para trazer um elétron de energias menores que $E_F$ para $E_F$. As duas integrais contribuem positivamente para a energia.

A capacidade térmica de um gás de elétrons é obtida diferenciando $\Delta U$ em relação a $T$. O único termo dependente de $T$ em (1.16) é $f(E)$, portanto a capacidade térmica eletrônica será

$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_0^\infty (E - E_F) \frac{df}{dT} D(E) dE \, . \tag{1.17}$$

Em um regime de baixas temperaturas uma boa aproximação é tomar a densidade de estados na energia de Fermi $D(E_F)$, portanto ela será constante e pode sair da integral em (1.17). A variação do potencial químico $\mu$ na distribuição de Fermi-Dirac com a

temperatura também pode ser ignorada e ele pode ser substituído pela energia de Fermi $E_F$. Desta forma, a capacidade térmica eletrônica para baixas temperaturas pode ser escrita como

$$C_{el} = \frac{1}{3}\pi^2 D(E_F) k_B^2 T \ . \tag{1.18}$$

A densidade de estados no nível de Fermi é dada por

$$D(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3N}{2k_B T_F} \ , \tag{1.19}$$

onde $k_B T_F \equiv E_F$. $T_F$ é chamada de temperatura de Fermi. Assim, podemos escrever

$$C_{el} = \frac{1}{2}\pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} \ . \tag{1.20}$$

Como já foi dito anteriormente, a capacidade térmica no metal será dada pela soma da capacidade térmica dos elétrons com a dos fônons. Aqui nós obtivemos apenas a capacidade térmica eletrônica, mas a parte dos fônons pode ser encontrada em livros de estado sólido como [48, 49]. A capacidade térmica será dada por

$$C = \gamma T + \alpha T^3 \ , \tag{1.21}$$

onde $\gamma$ e $\alpha$ são coeficientes característicos do material e são dados por

$$\gamma = \frac{\pi^2 N k_B}{2T_F} \tag{1.22}$$

e

$$\alpha = \frac{12\pi^4 k_B}{5T_D^3} \tag{1.23}$$

É possível obtermos o gráfico de $C/T$ em termos de $T^2$ experimentalmente. Teremos um gráfico linear, onde o coeficiente linear da curva determina $\alpha$ e a intersecção com a coordenada $T^2$ determina o valor de $\gamma$. O resultado que é obtido experimentalmente para o coeficiente $\gamma$, que denotaremos por $\gamma^*$, é diferente do resultado teórico no modelo de elétrons livres, embora sejam da mesma ordem de grandeza. Isso se deve ao fato que no modelo de elétrons livres foram desconsideradas várias interações. Como a temperatura de Fermi é inversamente proporcional à massa $m$ do elétron, o coeficiente $\gamma$ é proporcional a $m$. A diferença entre o resultado teórico e experimental pode ser explicada admitindo que os elétrons de condução no metal possuem uma massa efetiva $m^*$, que é definida como

$$m^* = \frac{\gamma^*}{\gamma} m \ . \tag{1.24}$$

Desta forma, podemos descrever os elétrons de condução em um metal como sendo elétrons

| Metal | $E_F$[eV] | $T_F[10^3\text{K}]$ | $\gamma^*/\gamma$ |
|---|---|---|---|
| Li | 4,72 | 54,8 | 2,18 |
| Na | 3,23 | 37,5 | 1.26 |
| K | 2,12 | 24,6 | 1,25 |
| Rb | 1,85 | 21,5 | 1,26 |
| Cs | 1,58 | 18,3 | 1,43 |
| Cu | 7,00 | 81,2 | 1,38 |
| Ag | 5,48 | 63,6 | 1,00 |
| Au | 5,51 | 63,8 | 1,14 |
| Be | 14,14 | 164,1 | 0,34 |
| Mg | 7,13 | 82,7 | 1,30 |

| Metal | $E_F$[eV] | $T_F[10^3\text{K}]$ | $\gamma^*/\gamma$ |
|---|---|---|---|
| Ca | 4,68 | 54,3 | 1,9 |
| Sr | 3,95 | 45,8 | 2,0 |
| Ba | 3,65 | 42,4 | 1,4 |
| Zn | 9,39 | 109,0 | 0,85 |
| Cd | 7,46 | 86,6 | 0,73 |
| Al | 11.63 | 134,9 | 1,48 |
| Ga | 10,35 | 120,1 | 0,58 |
| In | 8,60 | 99,8 | 1,37 |
| Pb | 9,37 | 108,7 | 1,97 |
| Sn | 10,03 | 116,4 | 1,26 |

Tabela 1: Energia de Fermi $E_F$, temperatura de Fermi $T_F$ e a razão entre a capacidade térmica eletrônica $\gamma^*$ observada experimentalmente e o coeficiente $\gamma$ dado por (1.22) para vários metais. Fonte: [48].

livres, mas com uma massa efetiva que carrega a informação sobre as interações que ele está sujeito no material. Na Tabela(1) podemos encontrar o valor da razão $\gamma^*/\gamma$ para vários metais.

## Semicondutores

Os semicondutores são geralmente classificados por sua resistividade elétrica na temperatura ambiente, com valores que variam de $10^{-2}$ a $10^9$ Ohm·cm, e suas propriedades eletrônicas são fortemente dependentes da temperatura. Na temperatura 0 K, os semicondutores são isolantes, mas com o aumento da temperatura, os elétrons são excitados termicamente da banda de valência para a banda de condução, e tanto os elétrons na banda de condução quanto os buracos deixados na banda de valência contribuem para a condutividade elétrica.

O fato dos semicondutores poderem ou não conduzir eletricidade faz deles ótimos materiais para aplicações em eletrônica. De fato, os semicondutores são o fundamento da eletrônica moderna. Entre os dispositivos baseados em semicondutores temos os transistores, diodos, termistores, detectores, interruptores, células fotovoltaicas e circuitos integrados analógicos ou digitais.

Para obtermos a equação de movimento para um elétron em uma banda de energia vamos olhar para o movimento de um pacote de onda sujeito a um campo elétrico. A velocidade de grupo é definida como $v_g = d\omega/dk$ e a frequência associada com a função

de onda de energia $E$ é dada por $\omega = E/\hbar$. Dessa forma teremos

$$v_g = \hbar^{-1}\frac{dE}{dk} \ . \tag{1.25}$$

O efeito do cristal no movimento do elétron está contido na relação de dispersão $E(\vec{k})$.

O trabalho $\delta E$ feito por uma campo elétrico $E_{el}$ em um elétron no intervalo de tempo $\delta t$ é dado por

$$\delta E = -eE_{el}v_g\delta t \ . \tag{1.26}$$

Usando (1.25), podemos escrever

$$\delta k = -(eE_{el}/\hbar)\delta t \ . \tag{1.27}$$

A equação acima pode ser escrita em termos da força externa $\vec{F}$ como

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} \ . \tag{1.28}$$

Essa é uma relação importante. No espaço livre, uma força externa é igual a $d(m\vec{v})/dt$, diferente do que acontece com um elétron em um cristal. Isso não é uma violação da segunda lei de Newton, pois um elétron em um cristal está sujeito a forças provenientes da rede cristalina como também de forças externas.

Olhando para a relação de dispersão para elétrons livres (1.5), vemos que o termo $k^2$ é responsável pela curvatura da relação $E$ versus $k$. Podemos considerar que a massa recíproca $1/m$ determina a curvatura. Dessa forma, uma mudança na curvatura significa uma mudança na massa, que agora se torna uma massa efetiva. Por exemplo, se o *gap* de energia é menor em comparação com a energia do elétron livre, então na região próxima ao *gap* a curvatura é aumentada por um fator de $\lambda/E_g$, onde $\lambda$ é a energia de um elétron livre e $E_g$ é o tamanho do *gap*. Em semicondutores a largura das bandas é da ordem de 20 eV, enquanto que o *gap* é da ordem de 0,2 a 2 eV. Isso significa que a massa recíproca é aumentada por um fator de 10 a 100 e a massa efetiva é reduzida de 0,1 a 0,01 em relação à massa do elétron. Isso vale na região próxima ao *gap* de energia. Para regiões distantes do *gap* as curvaturas e as massas são semelhantes às encontradas para elétrons livres.

O fato de a massa efetiva ser menor que a massa do elétron não significa que o cristal está menos pesado. O que acontece é que um elétron em um potencial periódico na presença de um campo elétrico ou magnético aplicado é acelerado em relação à rede cristalina como se sua massa fosse igual a massa efetiva.

Diferenciando a velocidade de grupo (1.25) obtemos

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1}\frac{d^2E}{dkdt} = \hbar^{-1}\left(\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt}\right) . \tag{1.29}$$

Usando (1.28) podemos escrever

$$\frac{dv_g}{dt} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\right)F . \tag{1.30}$$

Identificando $\hbar^2/(d^2E/dk^2)$ como a massa, a equação acima tem a forma da segunda lei de Newton, onde definimos a massa efetiva $m^*$ como sendo

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2} . \tag{1.31}$$

## 1.3 Massa Efetiva Variável

Uma consequência do modelo de massa efetiva discutido na seção anterior é a possibilidade de termos uma massa efetiva dependente da posição. Isso acontece, por exemplo, se considerarmos semicondutores não uniformes ou uma junção de dois materiais que tenham massas efetivas diferentes. A equação de Schrödinger com uma massa dependente da posição (MDP) foi por décadas um campo intenso de atividades de pesquisa, como demonstrado pelo número de trabalhos publicados sobre o assunto. A questão mais fundamental está na não comutatividade da massa, agora um operador, com o momento na energia cinética.

O operador de energia cinética não relativístico padrão da mecânica quântica é escrito como

$$T = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} , \tag{1.32}$$

que é válido quando a massa $m$ é constante. Com a MDP, a massa passa a ser um operador que não comuta com o operador momento, fazendo com que a energia cinética não seja um operador hermitiano. Com isso é necessário alterar $T$ para que ele satisfaça os requisitos impostos pela mecânica quântica para um operador que descreve um observável físico.

Muitas expressões para $T$ que levam em conta a dependência na posição da massa efetiva foram propostas na literatura com diferentes argumentos. A primeira delas foi feita em 1966 por BenDaniel e Duke [13]. Eles concluíram que para manter a conservação de corrente em uma junção de dois materiais com massas efetivas diferentes, o operador

(1.32) deveria ser substituído por

$$T_{BD} = \frac{1}{2}\vec{p}\frac{1}{m}\vec{p}\,. \tag{1.33}$$

Esse operador é mais utilizado quando temos uma variação abrupta na massa, como acontece na junção de dois materiais diferentes, embora existam outros operadores que são adequados para este caso. Em 1969, Gora e Williams [50] estudando estados e transporte eletrônicos de semicondutores mistos com gradiente na composição, onde há o aparecimento de uma massa efetiva dependente da posição, propuseram uma simetrização no operador (1.32) da forma

$$T_{GW} = \frac{1}{4}\left[\frac{1}{m}\vec{p}^{\,2} + \vec{p}^{\,2}\frac{1}{m}\right] \tag{1.34}$$

para torná-lo hermitiano. Eles propuseram que outras simetrizações são possíveis, dando início a uma discussão que dura até hoje acerca da existência ou não de um único operador de energia cinética com MDP.

Outra proposta para tornar o operador $T$ hermitiano foi sugerida por Zhu e Kroemer [51]. Eles investigaram as regras de conexão da função de onda de massa efetiva através de uma heterojunção abrupta expressando os resultados de uma aproximação de ligação forte (*tight-binding*) unidimensional em termo das funções de onda de massa efetiva. A proposta consiste em quebrar a massa em duas partes na forma

$$T_{ZK} = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{m}}\vec{p}^{\,2}\frac{1}{\sqrt{m}}\,. \tag{1.35}$$

Esse mesmo operador foi obtido depois por Cavalcante *et al.* [52] onde foi obtido o limite não relativístico do hamiltoniano de Dirac com MDP através de uma transformação de Foldy-Wouthuysen.

Em 1983 von Roos [53] propôs um operador mais geral que engloba todas as propostas anteriores. O operador tem dois termos, é construído para ser hermitiano e é escrito como

$$T_{vR} = \frac{1}{4}\left[m^{\alpha}\vec{p}m^{\beta}\vec{p}m^{\gamma} + m^{\gamma}\vec{p}m^{\beta}\vec{p}m^{\alpha}\right]\,, \tag{1.36}$$

onde $\alpha$, $\beta$ e $\gamma$ são os parâmetros ambíguos de ordenamento de von Roos. Eles são reais e satisfazem a condição

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \tag{1.37}$$

para que o resultado clássico seja recuperado quando a massa for constante. O operador $T_{BD}$ é obtido fazendo ($\alpha = 0$, $\beta = -1$, $\gamma = 0$), para o $T_{GW}$ temos ($\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = -1$) e o operador $T_{ZK}$ é recuperado quando ($\alpha = -1/2$, $\beta = 0$, $\gamma = -1/2$). Infelizmente

não existe um acordo a respeito de qual escolha para os parâmetros é a mais adequada, fazendo com que o uso desses operadores seja muito subjetivo.

Algumas outras propostas ainda foram feitas como a de Morrow e Brownstein em 1984 [54], que ao estudar o modelo de massa efetiva em heterojunções abruptas obtiveram um operador dado por

$$T_{MB} = \frac{1}{2} m^{\alpha} \vec{p} m^{\beta} \vec{p} m^{\alpha} \ , \tag{1.38}$$

que é uma subclasse do operador de von Roos com $\gamma = \alpha$, onde agora $2\alpha + \beta = -1$. Um caso particular do operador $T_{MB}$ foi sugerido por Mustafa e Mazharimousavi (MM) [55] com $\alpha = -1/4$. Uma outra subclasse do operador $T_{vR}$ com $\gamma = 0$ foi proposta por Dutra e Almeida [56] na forma

$$T_{LKDA} = \frac{1}{4} \left[ m^{\alpha} \vec{p} m^{\beta} \vec{p} + \vec{p} m^{\beta} \vec{p} m^{\alpha} \right] \ , \tag{1.39}$$

que é uma extensão do operador proposto por Li e Kuhn (LK) que é definido para $\alpha = -1/2$ [57]. Na referência [56] também foi mostrado que o operador proposto por LK é equivalente ao operador com três termos proposto por Weyl na forma

$$T_W = \frac{1}{8} \left[ \frac{1}{m} \vec{p}^{\,2} + 2\vec{p} \frac{1}{m} \vec{p} + \vec{p}^{\,2} \frac{1}{m} \right] \ . \tag{1.40}$$

O operador $T_W$ não é um caso particular do operador $T_{vR}$. Uma forma de colocarmos todos os operadores descritos aqui em uma única expressão é escrevendo

$$T_{DA} = \frac{1}{4(\delta + 1)} \left( \delta \left[ \frac{1}{m} \vec{p}^{\,2} + \vec{p}^{\,2} \frac{1}{m} \right] + m^{\alpha} \vec{p} m^{\beta} \vec{p} m^{\gamma} + m^{\gamma} \vec{p} m^{\beta} \vec{p} m^{\alpha} \right) \ . \tag{1.41}$$

A questão acerca de qual é a forma correta do operador de energia cinética com MDP ainda está em aberto e avançou muito pouco na última década.

## 1.4 Conclusões

Neste capítulo revisamos a teoria de massa efetiva para portadores de carga em metais e semicondutores. Nos metais a massa efetiva é obtida comparando o valor da capacidade térmica medido experimentalmente com a calculada considerando elétrons livres. Já existe tabelado o valor da massa efetiva para diversos metais encontrados na natureza. Nos semicondutores se define que a curvatura na relação de dispersão $E$ versus $k$ se deve a massa. Dessa forma, uma mudança na curvatura implica em uma mudança na massa, que agora é uma massa efetiva. Como consequência dessa teoria, em muitos sistemas físicos

podemos ter uma massa efetiva dependendo da posição, se tornando assim um operador que não comuta com o operador momento linear. Muitas propostas foram feitas para se obter o operador de energia cinética adequado para esses sistemas, mas esse ainda é um problema em aberto.

# 2 *Novo Modelo para Massa Efetiva Dependendo da Posição*

## 2.1 Introdução

Embora muitos avanços tenham sido feitos no entendimento de como a massa dependendo da posição muda a forma do hamiltoniano cinético, ainda não existe uma definição acerca da escolha mais adequada para os parâmetros $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ e $\delta$ discutidos no capítulo anterior. Como cada operador já proposto foi obtido para um sistema físico específico, parece que para sistemas físicos diferentes temos hamiltonianos cinéticos diferentes, cabendo a cada um encontrar a escolha mais adequada para um dado sistema físico que se queira estudar.

Neste capítulo propomos um novo modelo para o operador de energia cinética com massa dependendo da posição. Esse novo modelo não é um caso particular dos modelos existentes, mostrados anteriormente, e satisfaz os requisitos fundamentais da mecânica quântica. Usaremos esse novo modelo para encontrar a estrutura de bandas de uma heteroestrutura composta por dois metais.

## 2.2 Nosso Modelo

Na tentativa de encontrar um hamiltoniano cinético que descreva sistemas com massa variável, em geral, propomos um novo modelo para o operador de energia cinética [58]. O ponto principal do nosso modelo é considerar todas as permutações possíveis entre os operadores no hamiltoniano. Esse é um procedimento de quantização de uma teoria clássica mantendo sua forma estrutural, e foi usado com sucesso em outros problemas tais como oscilador harmônico, partícula quântica na presença de um campo magnético uniforme, etc. Quando a massa depende da posição ela se torna um operador. Portanto,

considerando todas as permutações possíveis, propomos um hamiltoniano na forma

$$T_L = \frac{1}{6}\left[\frac{1}{m}\vec{p}^{\,2} + \vec{p}\frac{1}{m}\vec{p} + \vec{p}^{\,2}\frac{1}{m}\right] \tag{2.1}$$

onde o operador padrão (1.32) é recuperado quando a massa é constante. Podemos notar que não existe nenhuma escolha para os parâmetros $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ e $\delta$ em (1.41) que recupere o nosso hamiltoniano. Portanto, o nosso operador não está incluído na família de operadores dada por (1.41).

O operador (2.1) é hermitiano, que é o primeiro requisito que ele deve satisfazer. Também é solução da Eq.(38) na referência [59], o que garante que ele é compatível com a invariância Galileana e satisfaz a equação de continuidade.

Nas próximas seções vamos utilizar esse operador para descrever alguns sistemas com massa efetiva variável e comparar nosso modelo com outras propostas.

## 2.3 Estrutura de Bandas para uma Heteroestrutura

Nessa seção vamos obter as bandas de energia de uma heteroestrutura, onde temos saltos periódicos da massa, utilizando primeiramente o modelo descrito pelo hamiltoniano (1.41) com $\alpha = 0$, $\beta = -1$ e $\delta = 0$, que como vimos, é o hamiltoniano mais utilizado quando temos saltos na massa e depois utilizaremos o nosso modelo para comparação.

O sistema que propomos está descrito pela Fig. 2, onde a periodicidade da massa é de $a + b$.

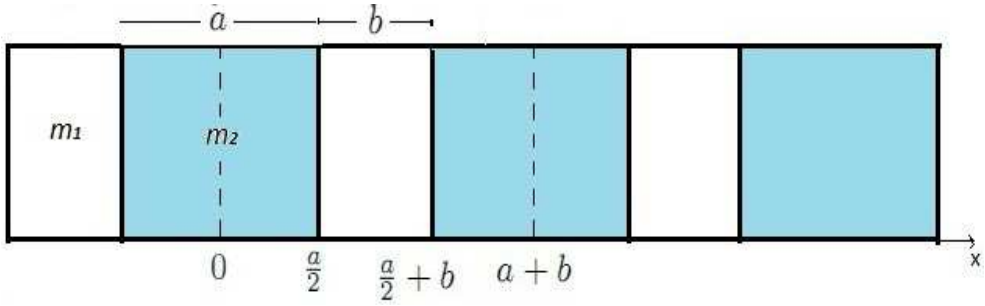


Figura 2: Uma heteroestrutura periódica. As regiões branca e azul(cinza) representam dois materiais diferentes. Em termos da teoria de massa efetiva, temos uma partícula "livre" com saltos periódicos na massa.

Como o hamiltoniano é periódico, as funções de onda satisfazem o teorema de Bloch, que é

$$\psi(x + n(a + b)) = e^{ikn(a+b)}\psi(x) \tag{2.2}$$

e

$$\psi'(x + n(a + b)) = e^{ikn(a+b)}\psi'(x) \ , \tag{2.3}$$

onde $k$ é o número de onda e $n$ é um inteiro. Com isso, nós reduzimos o problema para a célula unitária $0 \leq x \leq a + b$.

Precisamos agora das condições de contorno nas interfaces entre os dois materiais. Para obtermos isso, integramos o hamiltoniano (1.38) no intervalo $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ em torno do ponto $x_0$ [mostrado na Fig.3]. Considerando $\delta$ como sendo muito pequeno, temos

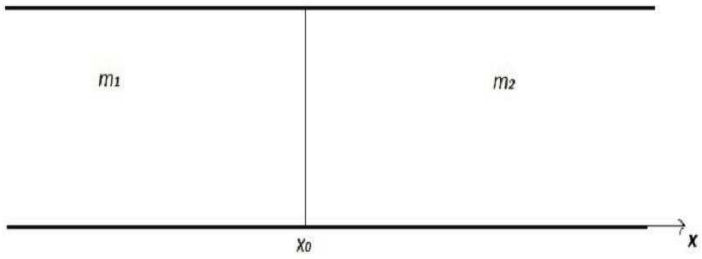


Figura 3: A interface entre os dois materiais.

$$\left[m^{\alpha+\beta}\frac{d}{dx}m^{\alpha}\psi\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} + (m_1^{\alpha} - m_2^{\alpha})\left(\frac{\psi'^{+}}{2}m_2^{\alpha+\beta} + \frac{\psi'^{-}}{2}m_1^{\alpha+\beta}\right) = -\frac{2E}{\hbar^2}\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}\psi dx \ . \tag{2.4}$$

Para obtermos a expressão (2.4) usamos o fato que

$$\psi(x)\delta(x - x_0) = \frac{\psi(x_0+) + \psi(x_0-)}{2}\delta(x - x_0) \ , \tag{2.5}$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac e também que

$$m(x)^{\lambda} = m_1^{\lambda}\mathrm{H}(x_0 - x) + m_2^{\lambda}\mathrm{H}(x - x_0) \ , \tag{2.6}$$

onde H é a função de Heaviside e $\lambda$ um número real.

Tomando o limite $\delta \to 0$, encontramos a condição de contorno no ponto $x_0$ para a primeira derivada da função de onda

$$\psi'(x_0^+)\left(m_1^\alpha m_2^{\alpha+\beta}+\frac{1}{m_2}\right)=\psi'(x_0^-)\left(m_2^\alpha m_1^{\alpha+\beta}+\frac{1}{m_1}\right)\ . \tag{2.7}$$

Para obtermos a condição de contorno para a função de onda, vamos considerar a primitiva da Eq.(1.38), que é

$$\left[m^{\alpha+\beta}\frac{d}{dx}m^\alpha\psi\right]+(m_1^\alpha-m_2^\alpha)\left(\frac{\psi'^+}{2}m_2^{\alpha+\beta}+\frac{\psi'^-}{2}m_1^{\alpha+\beta}\right)\mathrm{H}(x-x_0)=F(x)\ , \tag{2.8}$$

onde $F(x)=-\frac{2E}{\hbar^2}\int\psi dx$. Integrando (2.8) no intervalo $(x_0-\delta,x_0+\delta)$ obtemos

$$\left[m^{2\alpha+\beta}\psi\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}+\left(m_1^{\alpha+\beta}-m_2^{\alpha+\beta}\right)\left(\frac{\psi^+}{2}m_2^\alpha+\frac{\psi^-}{2}m_1^\alpha\right)=\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}F(x)dx\ . \tag{2.9}$$

Com $\delta\to 0$, temos

$$\psi(x_0^+)\left(m_2^\alpha m_1^{\alpha+\beta}+\frac{1}{m_2}\right)=\psi(x_0^-)\left(m_1^\alpha m_2^{\alpha+\beta}+\frac{1}{m_1}\right)\ . \tag{2.10}$$

Essa é a condição de contorno na interface para a função de onda.

Juntando as equações (2.2), (2.3), (2.7) e (2.10), o problema é totalmente especificado pelas condições de contorno

$$\psi\left(\frac{a^+}{2}\right)=\mu_o\psi\left(\frac{a^-}{2}\right)\ ,\psi\left(\frac{a}{2}+b^+\right)=\lambda_o\psi\left(\frac{a}{2}+b^-\right)\ , \tag{2.11}$$

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right)=\rho_o\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right)\ ,\psi'\left(\frac{a}{2}+b^+\right)=\sigma_o\psi'\left(\frac{a}{2}+b^-\right)\ , \tag{2.12}$$

$$\psi(a+b)=e^{ik(a+b)}\psi(0),\psi'(a+b)=e^{ik(a+b)}\psi'(0)\ , \tag{2.13}$$

onde

$$\begin{aligned}\mu_o&=\frac{m_1+m_2^{\alpha+1}m_1^{\alpha+\beta+1}}{m_2+m_1^{\alpha+1}m_2^{\alpha+\beta+1}}\ ,\ \rho_o=\frac{m_1+m_1^{\alpha+1}m_2^{\alpha+\beta+1}}{m_2+m_2^{\alpha+1}m_1^{\alpha+\beta+1}}\ ,\\ \lambda_o&=\frac{m_2+m_1^{\alpha+1}m_2^{\alpha+\beta+1}}{m_1+m_2^{\alpha+1}m_1^{\alpha+\beta+1}}\ ,\ \sigma_o=\frac{m_2+m_2^{\alpha+1}m_1^{\alpha+\beta+1}}{m_1+m_1^{\alpha+1}m_2^{\alpha+\beta+1}}\ .\end{aligned} \tag{2.14}$$

Com essas condições de contorno agora podemos obter as minibandas induzidas pela heteroestrutura.

A solução geral da equação de Schrödinger na célula unitária é dada por

$$\psi = \begin{cases} A\cos q_1 x + B\sin q_1 x, & 0 \le x < \frac{a}{2} \\ C\cos q_2 x + D\sin q_2 x, & \frac{a}{2} \le x < \frac{a}{2} + b \\ E\cos q_1 x + F\sin q_1 x, & \frac{a}{2} + b \le x \le a + b \end{cases} . \tag{2.15}$$

Aqui, $A$, $B$, $C$, $D$, $E$ e $F$ são coeficientes constantes. A derivada de (2.15) é

$$\psi' = \begin{cases} -q_1 A\sin q_1 x + q_1 B\cos q_1 x, & 0 \le x < \frac{a}{2} \\ -q_2 C\sin q_2 x + q_2 D\cos q_2 x, & \frac{a}{2} \le x < \frac{a}{2} + b \\ -q_1 E\sin q_1 x + q_1 F\cos q_1 x, & \frac{a}{2} + b \le x \le a + b \end{cases} , \tag{2.16}$$

onde $q_i = \frac{\sqrt{2m_i E}}{\hbar}$. Aplicando as condições de contorno (2.11) e (2.12) na solução geral, encontramos as seguintes relações entre os coeficientes

$$\begin{aligned} C = &\left[\mu_o \cos\frac{q_2 a}{2}\cos\frac{q_1 a}{2} + \rho_o\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\sin\frac{q_2 a}{2}\sin\frac{q_1 a}{2}\right] A \\ &+ \left[\mu_o \cos\frac{q_2 a}{2}\sin\frac{q_1 a}{2} - \rho_o\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\sin\frac{q_2 a}{2}\cos\frac{q_1 a}{2}\right] B , \end{aligned} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned} D = &\left[\mu_o \sin\frac{q_2 a}{2}\cos\frac{q_1 a}{2} - \rho_o\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\cos\frac{q_2 a}{2}\sin\frac{q_1 a}{2}\right] A \\ &+ \left[\mu_o \sin\frac{q_2 a}{2}\sin\frac{q_1 a}{2} + \rho_o\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\cos\frac{q_2 a}{2}\cos\frac{q_1 a}{2}\right] B , \end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\begin{aligned} E = &\left[\sigma_o\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\sin q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\sin q_2\left(\frac{a}{2}+b\right) + \lambda_o\cos q_2\left(\frac{a}{2}+b\right)\cos q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\right] A \\ &- \left[\sigma_o\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\sin q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\cos q_2\left(\frac{a}{2}+b\right) - \lambda_o\cos q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\sin q_2\left(\frac{a}{2}+b\right)\right] B \end{aligned} \tag{2.19}$$

e

$$\begin{aligned} F = &\left[\sigma_o\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\cos q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\cos q_2\left(\frac{a}{2}+b\right) + \lambda_o\sin q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\sin q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\right] B \\ &- \left[\sigma_o\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\cos q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\sin q_2\left(\frac{a}{2}+b\right) - \lambda_o\sin q_1\left(\frac{a}{2}+b\right)\cos q_2\left(\frac{a}{2}+b\right)\right] A. \end{aligned} \tag{2.20}$$

As condições de Bloch (2.13) nos levam a

$$E\cos q_1(a+b) + F\sin q_1(a+b) = e^{ik(a+b)}A \tag{2.21}$$

e

$$-E\sin q_1(a+b) + F\cos q_1(a+b) = e^{ik(a+b)}B . \tag{2.22}$$

Substituindo (2.19) e (2.20) em (2.21) e (2.22), teremos o seguinte sistema homogêneo de equações algébricas para os coeficientes $A$ e $B$,

$$\begin{aligned}\left(C_{11} - e^{ik(a+b)}\right) A + C_{12}B = 0 \\ C_{12}A + \left(C_{22} - e^{ik(a+b)}\right) B = 0\ .\end{aligned} \tag{2.23}$$

A condição para não termos solução trivial é fazer o determinante da matriz dos coeficientes igual a zero. Isso nos leva a

$$\cos k(a+b) = \cos q_1 a \cos q_2 b - \frac{1}{2}\left[\lambda_o\rho_o\frac{q_1}{q_2} + \mu_o\sigma_o\frac{q_2}{q_1}\right]\sin q_1 a \sin q_2 b\ . \tag{2.24}$$

O lado esquerdo de (2.24) é limitado ao intervalo $(-1{,}1)$, o que leva o lado direito a ter valores proibidos para a energia. Isso implica a existência de *bandas de energia* com *gaps*.

Fixando os parâmetros $\alpha = 0$ e $\beta = -1$, teremos

$$\mu_o = 1,\ \lambda_o = 1,\ \rho_o = \frac{m_1}{m_2},\ \sigma_o = \frac{m_2}{m_1}\ . \tag{2.25}$$

e recuperamos o resultado obtido em [60] com $V_0 = 0$.

Consideremos a heteroestrutura como sendo formada por Ga e Pb. A massa efetiva para esses materiais são $m_1 = 0{,}58m_e$ e $m_2 = 1{,}97m_e$, respectivamente, como mostrado na Tabela (1). Nós escolhemos $a = 1\mu m$ e $b = 0{,}50a$.

Na Fig.4 nós esboçamos o diagrama de bandas baseado na Fig.**??**.

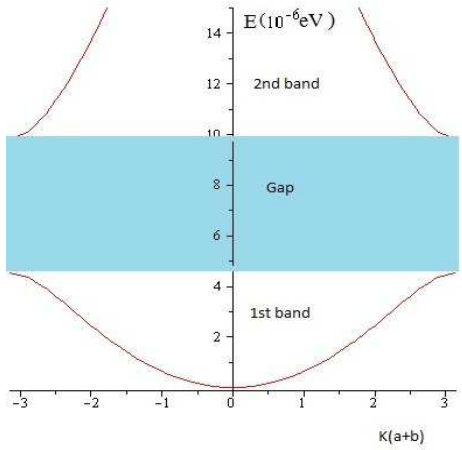


Figura 4: Minibanda na primeira zona de Brillouin. Um minigap é mostrado em azul(cinza).

Agora vamos resolver o mesmo problema utilizando o hamiltoniano (2.1) que nós propomos. Da mesma forma como fizemos no caso anterior, vamos obter as condições na

interface. Integrando (2.1) no intervalo $(x_0-\delta, x_0+\delta)$[mostrado na Fig. 3], temos

$$\left[\frac{1}{m}\psi'\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}+\left(\frac{1}{m_1}-\frac{1}{m_2}\right)\left(\frac{\psi'(x_0^+)+\psi'(x_0^-)}{2}\right)+\left[\frac{1}{m}\psi'\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}+ \left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m}\psi\right)\right]_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}=-\frac{6E}{\hbar^2}\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}\psi dx\ . \tag{2.26}$$

No limite $\delta\to 0$, nós encontramos a condição de contorno para a derivada da função de onda

$$\psi'(x_0^+)=\left(\frac{m_1+5m_2}{5m_1+m_2}\right)\psi'(x_0^-)\ . \tag{2.27}$$

A primitiva de (2.1) é dada por

$$m^{-1}\psi'+\left(\frac{1}{m_1}-\frac{1}{m_2}\right)\left(\frac{\psi'(x_0^+)+\psi'(x_0^-)}{2}\right)H(x-x_0)+m^{-1}\psi'+ \frac{d}{dx}\left(m^{-1}\psi\right)=F(x)\ , \tag{2.28}$$

onde $F(x)=-\frac{6E}{\hbar^2}\int\psi dx$. Integrando (2.28) na vizinhança de $x_0$, nós encontramos

$$3\left[\frac{1}{m}\psi\right]_{x_0+\delta}^{x_0+\delta}+\left(\frac{1}{m_1}-\frac{1}{m_2}\right)\left(\psi(x_0^+)+\psi(x_0^-)\right)=\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}F(x)dx\ . \tag{2.29}$$

No limite $\delta\to 0$, encontramos a condição de contorno para a função de onda

$$\psi(x_0^+)=\left(\frac{m_1+2m_2}{2m_1+m_2}\right)\psi(x_0^-)\ . \tag{2.30}$$

Das condições de interface (2.27) e (2.30), e evocando as condições de Bloch (2.2) e (2.3), o conjunto de condições de contorno obtido para (2.1) é dado por

$$\psi\left(\frac{a^+}{2}\right)=\mu_n\psi\left(\frac{a^-}{2}\right)\ ,\psi\left(\frac{a}{2}+b^+\right)=\lambda_n\psi\left(\frac{a}{2}+b^-\right)\ , \tag{2.31}$$

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right)=\rho_n\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right)\ ,\psi'\left(\frac{a}{2}+b^+\right)=\sigma_n\psi'\left(\frac{a}{2}+b^-\right)\ , \tag{2.32}$$

$$\psi(a+b)=e^{ik(a+b)}\psi(0),\psi'(a+b)=e^{ik(a+b)}\psi'(0)\ , \tag{2.33}$$

onde

$$\mu_n = \frac{m_1 + 2m_2}{2m_1 + m_2}\ ,\ \rho_n = \frac{m_1 + 5m_2}{5m_1 + m_2}\ ,$$
$$\lambda_n = \frac{m_2 + 2m_1}{2m_2 + m_1}\ ,\ \sigma_n = \frac{m_2 + 5m_1}{5m_2 + m_1}\ . \tag{2.34}$$

Com isso, da mesma forma como foi feito anteriormente, teremos a seguinte relação

$$\cos k(a+b) = \cos q_1 a \cos q_2 b - \frac{1}{2}\left[\lambda_n \rho_n \frac{q_1}{q_2} + \mu_n \sigma_n \frac{q_2}{q_1}\right] \sin q_1 a \sin q_2 b. \tag{2.35}$$

A diferença entre as Eqs.(2.24) e (2.35) aparece devido aos coeficientes (2.34). Na Fig.5 esboçamos o diagrama de bandas na primeira zona de Brillouin para o nosso modelo com os mesmos valores de antes. Novamente temos uma estrutura de bandas com regiões proibidas. $m_1 = 0{,}58m_e$, $m_2 = 1{,}97m_e$, $a = 1\mu m$ e $b = 0{,}50a$..

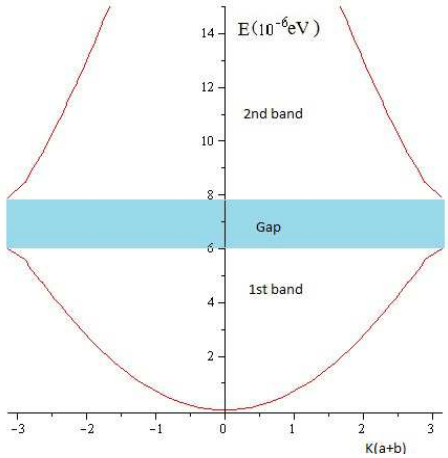


Figura 5: Energia de bandas na primeira zona de Brillouin para $m_1 = 0{,}58m_e$, $m_2 = 1{,}97m_e$, $a = 1\mu m$ e $b = 0{,}50a$. Nós ainda temos um *gap* de energia, mas agora ele é menor que no caso anterior.

A diferença entre os resultados obtidos com os dois modelos é apenas quantitativa, e não qualitativa. Apenas um experimento poderá dizer qual dos dois modelos utilizados aqui é o mais apropriado.

## 2.4 Conclusões

O ponto principal neste capítulo é a proposta de um novo e mais natural hamiltoniano para a dinâmica quântica de sistemas com massa efetiva dependentes da posição.

Como foi discutido no capítulo anterior, o hamiltoniano (1.41) não é único e existem

diferentes escolhas para os parâmetros $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ e $\delta$. O hamiltoniano (2.1) que propomos é único e não é compatível e nem é um caso particular das propostas anteriores, pois não existe nenhuma escolha para os parâmetros $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ e $\delta$ em (1.41) para se obter (2.1). Nosso hamiltoniano cinético é hermitiano, é compatível com a invariância galileana, satisfaz à condição de continuidade e, como vimos, não tem inconsistência quando a massa é descontínua. Estruturas mais complexas, como por exemplo, heteroestruturas deformadas [61], não podem ser modeladas pelos hamiltonianos aqui discutidos, sendo necessário um operador mais geral.

Como uma aplicação, encontramos as minibandas de energia para uma heteroestrutura formada por dois materiais diferentes. Para isso, nós utilizamos dois hamiltonianos diferentes, e os resultados encontrados mostram que os modelos são equivalentes.

# 3 *Partícula Confinada a uma Superfície Curva com Massa Efetiva Variável*

## 3.1 Introdução

A investigação de sistemas quânticos curvos em duas dimensões é um importante e interessante ramo da física da matéria condensada. Isso se deve à possibilidade de se construir substratos curvos quase bidimensionais em diferentes formatos [62]. Na descrição teórica desses sistemas a geometria diferencial de superfícies desempenha um papel importante. As investigações mais interessantes são aquelas que propõem algum fenômeno induzido pela curvatura, como encontramos nas referências [63, 64, 65].

Os portadores de carga em uma superfície bidimensional curva podem ter a massa efetiva dependendo da posição. Neste capítulo vamos obter a equação de Schrödinger para uma partícula quântica com massa efetiva variável que tem seu movimento restrito a uma superfície curva. Partimos do nosso modelo para o hamiltoniano cinético com MDP, que foi proposto no capítulo anterior, e seguimos a abordagem feita por da Costa [66], onde a partícula é confinada a uma superfície fina, dando origem a um potencial geométrico. Depois usaremos o nosso resultado para estudar uma junção cilíndrica.

## 3.2 O Hamiltoniano

Vamos considerar uma partícula com massa efetiva variável permanentemente confinada a uma superfície $S$ com equações paramétricas $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$. Consideramos a partícula confinada a uma interface fina com largura constante $d$ e o vínculo com a superfície é adquirido no limite em que $d \to 0$. Em coordenadas curvilíneas ($q_1$,$q_2$,$q_3$), a

equação (2.1) é escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{G}}\partial_\mu\left(\sqrt{G}G^{\mu\nu}\partial_\nu\psi\right)\right]-\frac{\hbar^2}{2}\left[G^{\mu\nu}\left(\partial_\nu\frac{1}{m}\right)(\partial_\mu\psi)\right]$$
$$-\frac{\hbar^2}{6}\left[\frac{1}{\sqrt{G}}\partial_\mu\left(\sqrt{G}G^{\mu\nu}\partial_\nu\frac{1}{m}\right)\right]\psi+V_\lambda(q_3)\psi=\imath\hbar\partial_t\psi\ , \tag{3.1}$$

onde $G_{\mu\nu}$ são os coeficientes da *primeira forma fundamental*, com $\mu$,$\nu$ = 1,2,3, $G$ = det($G_{\mu\nu}$). Adicionamos um potencial $V_\lambda(q_3)$ que confina a partícula a uma interface fina, da mesma forma que foi feito por da Costa. $q_1$ e $q_2$ são as coordenadas longitudinais (tangentes) enquanto que $q_3$ é a transversal (normal) à superfície.

Podemos decompor $G_{\mu\nu}$ como

$$\begin{aligned} G_{ij} &= g_{ij}+\left[\alpha g+(\alpha g)^T\right]_{ij}q_3+\left(\alpha g\alpha^T\right)q_3^2 \\ G_{i3} &= G_{3i}=0 \\ G_{33} &= 1\ , \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde $i$,$j$ = 1,2, $g_{ij}=\frac{\partial\vec{r}}{\partial q_i}\cdot\frac{\partial\vec{r}}{\partial q_j}$ e $\alpha_{ij}$ são as *equações de Weingarten* .

Considerando o *operador Laplace-Beltrami* dado por

$$D=\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\sqrt{g}g^{ij}\partial_j \tag{3.3}$$

e a equação (3.2), nós temos

$$\begin{aligned} - &\ \frac{\hbar^2}{2m}(D\psi)-\frac{\hbar^2}{6}\left(D\frac{1}{m}\right)\psi-\frac{\hbar^2}{2}g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\psi)- \\ - &\ \frac{\hbar^2}{6}\left(\partial_{q_3}^2\frac{1}{m}+\partial_{q_3}(\ln\sqrt{G})\partial_{q_3}\frac{1}{m}\right)\psi- \\ - &\ \frac{\hbar^2}{2}\left(\partial_{q_3}^2\psi+\partial_{q_3}(\ln\sqrt{G})\partial_{q_3}\psi\right)\frac{1}{m}-\frac{\hbar^2}{2}(\partial_{q_3}\frac{1}{m})(\partial_{q_3}\psi)+ \\ + &\ V_\lambda(q_3)\psi=\imath\hbar\partial_t\psi\ . \end{aligned} \tag{3.4}$$

Escrevendo a massa efetiva da partícula como sendo $m\equiv m(q_1,q_2)$, ou seja, a massa só varia na superfície, temos que $\partial_{q_3}\frac{1}{m}=\partial_{q_3}^2\frac{1}{m}\equiv 0$. Então a equação (3.4) se reduz a

$$\begin{aligned} - &\ \frac{\hbar^2}{2m}(D\psi)-\frac{\hbar^2}{6}\left(D\frac{1}{m}\right)\psi-\frac{\hbar^2}{2}g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\psi)- \\ - &\ \frac{\hbar^2}{2}\left(\partial_{q_3}^2\psi+\partial_{q_3}(\ln\sqrt{G})\partial_{q_3}\psi\right)\frac{1}{m}+V_\lambda(q_3)\psi=\imath\hbar\partial_t\psi. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Introduzindo uma nova função de onda dada por

$$\chi(q_1,q_2,q_3) = [f(q_1,q_2,q_3)]^{1/2}\psi(q_1,q_2,q_3)\ , \tag{3.6}$$

com

$$f(q_1,q_2,q_3) = 1 + \mathrm{Tr}(\alpha_{ij})q_3 + \det(\alpha_{ij})q_3^2\ , \tag{3.7}$$

podemos reescrever a equação (3.5) como

$$\begin{aligned} &- \sqrt{f}\frac{\hbar^2}{2m}\left(D\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) - \frac{\hbar^2}{6}\left(D\frac{1}{m}\right)\chi - \\ &- \sqrt{f}\frac{\hbar^2}{2}g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)\left(\partial_i\frac{\chi}{\sqrt{f}}\right) - \\ &- \frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial^2_{q_3}\chi + \frac{1}{4f^2}\left[(\partial_{q_3}f)^2 - 2f\partial^2_{q_3}f\right]\chi\right) + \\ &+ V_\lambda(q_3)\chi = \imath\hbar\partial_t\chi\ . \end{aligned} \tag{3.8}$$

Tomando $q_3 \to 0$, temos

$$\begin{aligned} &- \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\chi\right)\right] - \frac{\hbar^2}{6}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{1}{m}\right)\right]\chi \\ &- \frac{\hbar^2}{2}\left[g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\chi)\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\left([\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij})\right)\chi \\ &- \frac{\hbar^2}{2m}\partial^2_{q_3}\chi + V_\lambda(q_3)\chi = \imath\hbar\partial_t\chi\ . \end{aligned} \tag{3.9}$$

Escrevendo $\chi = \chi_t(q_1,q_2,t)\times\chi_n(q_3,t)$, onde os índices $n$ e $t$ representam "normal" e "tangente", respectivamente, nós podemos separar a equação acima da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial^2_{q_3}\chi_n + V_\lambda(q_3)\chi_n = \imath\hbar\partial_t\chi_n \tag{3.10}$$

e

$$\begin{aligned} &- \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\chi_t\right)\right] - \frac{\hbar^2}{6}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\frac{1}{m}\right)\right]\chi_t \\ &- \frac{\hbar^2}{2}\left[g^{ij}\left(\partial_j\frac{1}{m}\right)(\partial_i\chi_t)\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\left([\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij})\right)\chi_t \\ &= \imath\hbar\partial_t\chi_t\ . \end{aligned} \tag{3.11}$$

O último termo em (3.11) é o potencial geométrico, que nós chamaremos de *potencial de da Costa*, $V_{\mathrm{daC}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left([\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij})\right)$. Podemos escrever esse potencial como

$$V_{\mathrm{daCosta}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathrm{M}^2 - \mathrm{K}\right]\ , \tag{3.12}$$

onde M e K são a curvatura média e gaussiana da superfície dada, respectivamente. Se considerarmos a massa como sendo constante recuperamos o resultado obtido por da Costa.

Na próxima seção, vamos considerar a primeira aplicação para o hamiltoniano (3.11).

### 3.2.1 Transmissão em Junções Cilíndricas

Vamos considerar a junção cilíndrica mostrada na Fig. 6, onde temos a junção de dois cilindros com raios diferentes e a massa efetiva variando com o raio do cilindro. A junção tem tamanho $L$. Na região da junção, o raio e a massa efetiva mudam continuamente.

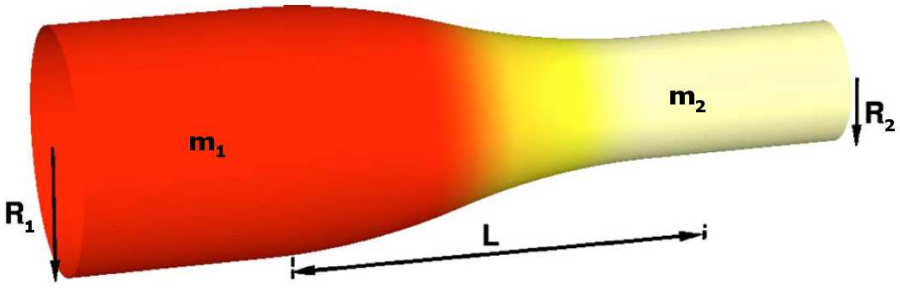


Figura 6: Junção entre dois cilindros de raios diferentes com a massa efetiva variando com o raio do cilindro. $L$ é o tamanho da junção.

Esse problema já foi investigado em [67], onde foi obtido o coeficiente de transmissão para diferentes valores de $R_1$ e $R_2$. No entanto, eles consideraram que os portadores de carga na junção tinham uma massa efetiva constante, não levando em conta a sua dependência com a posição. Nós vamos fazer uma descrição mais completa, levando em conta a variação da massa com o raio do cilindro.

A parametrização da superfície é dada por

$$\begin{aligned} x &= \rho(y)\cos(\phi), \\ y &= y, \\ z &= \rho(y)\sin(\phi). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Queremos uma transição suave entre os cilindros. Para isso, o polinômio de ordem

mais baixa que garante uma superfície com regularidade $C^2$ é

$$\rho(y) = R_1 + (R_2 - R_1)\left[6\left(\frac{y}{L}\right)^5 - 15\left(\frac{y}{L}\right)^4 + 10\left(\frac{y}{L}\right)^3\right] , \tag{3.14}$$

onde $L$ é o comprimento da junção entre os cilíndros. A primeira e segunda forma fundamental são então dadas por

$$\mathbf{g}_{ij} = \begin{pmatrix} \rho(y)^2 & 0 \\ 0 & 1+\rho'(y)^2 \end{pmatrix} \tag{3.15}$$

e

$$\mathbf{h}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{1+\rho'(y)^2}} \begin{pmatrix} \rho(y) & 0 \\ 0 & -\rho''(y) \end{pmatrix} . \tag{3.16}$$

A curvatura média e gaussiana são dadas respectivamente por

$$M = \frac{1}{2g}(g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}) \tag{3.17}$$

e

$$K = \frac{1}{g}(h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}) . \tag{3.18}$$

Portanto, temos que

$$M = \frac{1+\rho'(y)^2 - \rho(y)\rho''(y)}{2\rho(y)[1+\rho'(y)^2]^{3/2}} \tag{3.19}$$

e

$$K = -\frac{\rho''(y)}{\rho(y)[1+\rho'(y)^2]^2} . \tag{3.20}$$

Dessa forma, podemos escrever o potencial geométrico para a junção cilíndrica na forma

$$V_{daCosta} = -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{[1+\rho'(y)^2+\rho(y)\rho''(y)]^2}{\rho(y)^2[1+\rho'(y)^2]^3} . \tag{3.21}$$

Substituindo o potencial geométrico em (3.11), temos que o hamiltoniano será dado por

$$\begin{aligned} H = &-\frac{\hbar^2}{2m}\left[(g^{-1})_{11}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + (g^{-1})_{22}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial y}\sqrt{y}(g^{-1})_{22}\right)\frac{\partial}{\partial y}\right] \\ &-\frac{\hbar^2}{6}\left[(g^{-1})_{11}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\frac{1}{m}\right) + (g^{-1})_{22}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}\frac{1}{m}\right) + \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial y}\sqrt{y}(g^{-1})_{22}\right)\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m}\right)\right] \\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\left[(g^{-1})_{11}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{1}{m}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + (g^{-1})_{22}\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m}\right)\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] + V_{daCosta} . \end{aligned} \tag{3.22}$$

Como a massa não depende da coordenada $\phi$, podemos escrever

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[(g^{-1})_{11}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + (g^{-1})_{22}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial y}\sqrt{y}(g^{-1})_{22}\right)\frac{\partial}{\partial y}\right] -\frac{\hbar^2}{6}\left[(g^{-1})_{22}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}\frac{1}{m}\right) + \frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial y}\sqrt{y}(g^{-1})_{22}\right)\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m}\right)\right] -\frac{\hbar^2}{2m}\left[(g^{-1})_{22}\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m}\right)\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] + V \ . \tag{3.23}$$

O potencial geométrico depende apenas da coordenada $y$, portanto podemos separar a equação de Schrödinger 2D em duas equações 1D

$$\Phi'' + A\Phi = 0 \tag{3.24}$$

e

$$\Upsilon'' + [F(y) + m(m^{-1})']\Upsilon' + [m/3((m^{-1})'' +F(y)(m^{-1})') + G(y)(E_I - V)2m/\hbar^2]\Upsilon = 0 \ , \tag{3.25}$$

onde $\Phi(\phi)$ e $\Upsilon(y)$ são as autofunções angular e axial, respectivamente. Aqui,

$$F(y) = \rho^{-1}\rho'[1 - \rho\rho''(1 + (\rho')^2)^{-1}] \tag{3.26}$$

e

$$Gy = 1 + (\rho')^2 \ . \tag{3.27}$$

Se a massa for constante recuperamos o hamiltoniano obtido em [67].

Resolvendo as equações diferenciais (3.24) e (3.25) será obtido as autofunções e as autoenergias, para assim analisarmos o transporte eletrônico na junção e verificarmos o efeito da massa variável, comparando com o caso onde ela é constante. Podemos ver que, pelo fato da massa depender da posição, temos dois termos adicionais na Eq.(3.25), o que sugere que a variação da massa afetará o transporte eletrônico.

## 3.3 Conclusões

Neste capítulo nós obtivemos a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma superfície bidimensional curva com a massa efetiva dependendo da posição. Para isso nós utilizamos o operador de energia cinética com massa variável que nós propomos no capítulo anterior e seguimos a abordagem de da Costa, onde surge um potencial geométrico. Nós verificamos que o potencial geométrico não é afetado pelo fato da massa

ser variável. Como uma primeira aplicação, essa equação foi usada para investigar uma junção de dois cilindros com raios diferentes, levando em conta que a massa varia com o raio do cilindro. Fazendo separação de variáveis, mostramos que a equação diferencial na direção do eixo de simetria do cilindro ganha dois termos adicionais como consequência da massa ser variável, o que deve afetar o transporte eletrônico na junção.

# *Parte II*

# *Hamiltoniano de Dirac Efetivo*

# 4 Equação de Dirac Efetiva

## 4.1 Introdução

A aproximação contínua mais utilizada na física da matéria condensada é a teoria de massa efetiva, que estudamos nos capítulos anteriores. Outro modelo contínuo que vem sendo utilizado cada vez mais é um hamiltoniano de Dirac efetivo. A equação de Dirac descreve partículas relativísticas, diferente das partículas que observamos nos materiais que são estudados, mas o aparecimento de uma relação de dispersão linear possibilitou o seu uso de forma efetiva para descrever portadores de carga em certos materiais. Esses materiais são chamados de matéria topológica, pois estão relacionados com novas fases da matéria de ordem topológica, e fazem uma ponte entre física da matéria condensada e física de altas energias.

Neste capítulo vamos introduzir a equação de Dirac relativística para então entendermos como ela pode ser usada de forma efetiva para descrever portadores de carga no grafeno e em isolantes topológicos.

## 4.2 Equação de Dirac

Em 1928 Paul A. M. Dirac propôs uma equação de onda para descrever elétrons relativísticos [68]. Diferente da mecânica quântica não relativística, onde a posição é um operador e o tempo não, em uma teoria relativística tempo e espaço devem ser tratados igualmente.

Em 1926, dois anos antes da proposta de Dirac, Oskar Klein e Walter Gordon haviam proposto uma equação para descrever elétrons relativísticos da forma

$$\left(\Box + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi = \left(\frac{\partial^2}{c^2\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0\ , \tag{4.1}$$

onde foi considerada uma derivada de segunda ordem no tempo, e dessa forma, se obteve

um tratamento igual para tempo e espaço. Essa equação é conhecida como equação de Klein-Gordon.

A equação de Klein-Gordon foi rejeitada a princípio, pois apresenta soluções de energia negativa que levam a "densidades de probabilidade" negativas. Isso é uma consequência do fato de termos uma derivada segunda no tempo. Diferente disso, Dirac propôs uma equação relativística na forma da equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \ , \tag{4.2}$$

onde o hamiltoniano $\hat{H}$ deve ter apenas derivadas de primeira ordem da posição, para manter a equivalência entre espaço e tempo. A proposta de Dirac foi

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar c}{i}\left(\hat{\alpha}_1\frac{\partial}{\partial x^1} + \hat{\alpha}_2\frac{\partial}{\partial x^2} + \hat{\alpha}_3\frac{\partial}{\partial x^3}\right) + \hat{\beta}m_0c^2\right]\psi \ , \tag{4.3}$$

onde os coeficientes $\hat{\alpha}_i$ não podem ser apenas números, caso contrário a expressão acima não seria invariante por rotações espaciais. De fato, os coeficientes $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ são matrizes. Escrevendo apenas derivadas de primeira ordem, Dirac evitou o aparecimento de "densidades de probabilidade" negativas, como acontece na equação de Klein-Gordon.

Na verdade, não existe nada de errado com a equação de Klein-Gordon, ela apenas precisava ser melhor interpretada. E a interpretação correta veio em 1934, quando W. Pauli e V. F. Weisskopf mostraram que a "densidade de probabilidade" na verdade era uma densidade de carga, e que portanto, não tinha nenhum problema em ser negativa. Isso reviveu a equação de Klein-Gordon. Outro fato importante é que a equação de Klein-Gordon não descreve partículas de spin 1/2, portanto não é útil para descrever elétrons. Nesta tese vamos obter a equação de Dirac como está feito por Sakurai [69], uma forma diferente da que foi feita originalmente por Dirac. Para isso, vamos começar falando sobre o spin.

Considerando a mecânica quântica não-relativística, percebemos que para levar em conta o spin, é necessário adicionar o termo de Pauli, que mostra a interação do momento magnético de spin com o campo magnético,

$$H^{(Spin)} = -(e\hbar/2mc)\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \ , \tag{4.4}$$

onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli. A adição deste termo é bastante artificial, principalmente se considerarmos que todas as interações eletromagnéticas "fundamentais" são geradas pela substituição $\vec{p} \longrightarrow \vec{p} - e\vec{A}/c$. Para partículas de spin 1/2, uma forma mais natural de

obtermos este termo é reescrevendo o operador de energia cinética na ausência de campo eletromagnético

$$H^{(Cin)} = \vec{p}^{\,2}/2m \tag{4.5}$$

na forma

$$H^{(Cin)} = (\sigma \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})/2m \; . \tag{4.6}$$

Isso é possível pois a fórmula

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \tag{4.7}$$

é verdadeira mesmo quando $\vec{A}$ e $\vec{B}$ são operadores.

A forma alternativa (4.6) tem a mesma forma que (4.5) quando não temos potencial vetor. Contudo, quando fazemos a substituição $\vec{p} \to \vec{p} - e\vec{A}/c$, nós temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} \;\; - \;\; \frac{e\vec{A}}{c}\right) \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right) & \\ = \;\; \frac{1}{2m}\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)^2 + \frac{i}{2m}\vec{\sigma} \cdot \left[\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right) \times \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)\right] & \\ = \;\; \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \; , & \end{aligned} \tag{4.8}$$

onde usamos

$$\vec{p} \times \vec{A} = -i\hbar(\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \vec{A} \times \vec{p} \, . \tag{4.9}$$

Estamos interessados em uma equação de onda relativística para partículas de spin 1/2. Portanto, da mesma forma que incorporamos o spin do elétron em uma teoria não-relativística, vamos fazer o mesmo partindo da expressão relativística

$$(E^2/c^2) - \vec{p}^{\,2} = (mc)^2 \tag{4.10}$$

e escrever

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right)\left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) = (mc)^2 \; , \tag{4.11}$$

onde

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = i\hbar c\frac{\partial}{\partial x_0} \tag{4.12}$$

e

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \; . \tag{4.13}$$

Com isso, podemos escrever a equação de segunda ordem

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}+\sigma\cdot i\hbar\nabla\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}-\sigma\cdot i\hbar\nabla\right)\phi=(mc)^2\phi \tag{4.14}$$

para uma partícula livre, onde $\phi$ agora é uma função de onda com duas componentes.

Estamos interessados em uma equação de onda que tenha apenas derivadas de primeira ordem no tempo. Olhando para o electromagnetismo, vemos que a equação de Maxwell no vácuo $\partial^\mu F_{\mu\nu}=0$ é de primeira ordem. $F_{\mu\nu}$ é obtido derivando $A_\mu$, e assim, é possível escrever $\Box A_\mu=0$, que é uma equação de segunda ordem. $F_{\mu\nu}$ tem mais componentes que $A_\mu$, portanto, esse aumento no número de componentes é o preço pago por ter uma equação de primeira ordem.

Em analogia com o electromagnetismo, podemos obter um par de equações de primeira ordem definindo duas funções de onda de duas componentes $\phi^{(R)}$ e $\phi^{(L)}$ como

$$\phi^{(R)}=\frac{1}{mc}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}+\sigma\cdot i\hbar\nabla\right)\phi\ ,\phi^{(L)}=\phi \tag{4.15}$$

aumentando o número de componentes para quatro. Os índices (R) e (L) descrevem a helicidade (Right e Left) do elétron. O índice (R) indica que o spin está paralelo a direção do momento e o índice (L) indica que o spin está antiparalelo a direção do momento. Com isso, a equação de segunda ordem (4.14) é equivalente a duas equações de primeira ordem

$$\left(i\hbar\sigma\cdot\nabla+i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\right)\phi^{(L)}=mc\phi^{(R)}, \tag{4.16}$$

$$\left(-i\hbar\sigma\cdot\nabla+i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\right)\phi^{(R)}=mc\phi^{(L)} \tag{4.17}$$

que é equivalente à equação de Dirac.

Para obtermos a equação original escrita por Dirac, vamos somar e subtrair (4.16) e (4.17). Com isso, temos que

$$i\hbar(\sigma\cdot\nabla)(\phi^{(R)}-\phi^{(L)})-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_0}(\phi^{(R)}+\phi^{(L)})\right)=-mc(\phi^{(R)}+\phi^{(L)})\ , \tag{4.18}$$

$$i\hbar(\sigma\cdot\nabla)(\phi^{(R)}+\phi^{(L)})+i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_0}(\phi^{(R)}-\phi^{(L)})\right)=-mc(\phi^{(R)}-\phi^{(L)})\ . \tag{4.19}$$

Definindo a função de onda de quatro componentes

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^{(R)}+\phi^{(L)}\\ \phi^{(R)}-\phi^{(L)}\end{pmatrix} \tag{4.20}$$

podemos escrever

$$\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0\ , \tag{4.21}$$

onde as matrizes $4\times 4$, $\gamma_\mu$, com $\mu = 0,1,2,3$, são chamadas de matrizes de Dirac. Elas são dadas por

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix}\ , \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\ . \tag{4.22}$$

As matrizes de Dirac obedecem à relação de anticomutatividade

$$\{\gamma_\mu,\gamma_\nu\} = \gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \tag{4.23}$$

e também são hermitianas

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu\ . \tag{4.24}$$

Definindo as matrizes

$$\beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\ , \alpha_k = i\gamma_4\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \tag{4.25}$$

podemos escrever a equação de Dirac (4.21) como

$$H\psi = i\hbar\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\ , \tag{4.26}$$

onde

$$H = -ic\hbar\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2 \tag{4.27}$$

que está na forma (4.3) que foi originalmente proposta por Dirac.

Um dos casos onde podemos obter uma solução exata da equação de Dirac é o problema de uma partícula livre. A solução é dada na forma de uma onda plana

$$\psi = \omega e^{-ip\cdot x}\ , \tag{4.28}$$

onde $\omega$ é um spinor de quatro componentes independente de $x$. É conveniente separar o spinor $\omega$ em dois spinores de duas componentes $\phi$ e $\chi$

$$\omega = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}\ . \tag{4.29}$$

Substituindo (4.28) em (4.26) nós obtemos

$$E = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\sigma\cdot p \\ c\sigma\cdot p & -mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{4.30}$$

Com isso, teremos duas equações acopladas dadas por

$$(E - mc^2)\phi = \sigma \cdot p\chi \tag{4.31}$$

$$(E + mc^2)\chi = \sigma \cdot p\phi \tag{4.32}$$

Desacoplando as equações, obtemos

$$\omega = \begin{pmatrix} \phi \\ \frac{c\sigma \cdot p}{E+mc^2}\phi \end{pmatrix} . \tag{4.33}$$

De (4.32) temos que

$$\chi = \frac{c\sigma \cdot p}{E + mc^2}\phi \, . \tag{4.34}$$

Substituindo em (4.31) e lembrando da relação (4.6) nós temos que

$$(E - mc^2)(E + mc^2)\phi = c^2p^2\phi \tag{4.35}$$

para qualquer $\phi$.

Portanto, recuperamos a relação entre a energia e o momento dada por

$$E = \pm(c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} \tag{4.36}$$

Esta relação nos permite energias positivas e negativas. A interpretação dada por Dirac para isso é que energias positivas descrevem partículas e as energias negativas descrevem antipartículas.

Podemos notar que energias no intervalo $-mc^2 < E < mc^2$ não são possíveis. Dessa forma, teremos valores permitidos e proibidos de energia, como mostra a Figura(7). Se estamos falando de partículas de massa nula, teremos uma relação linear entre a energia e o momento na forma $E = \pm cp$. Isso faz com que não tenhamos mais valores proibidos de energia. Em uma linguagem de teoria de bandas eletrônicas, teremos uma relação de dispersão linear dando origem a uma estrutura de banda cônica com *gap* nulo.

## 4.3 Grafeno

O grafeno é uma folha planar composta apenas por átomos de carbono organizados em uma estrutura cristalina hexagonal bidimensional (2D) com ligações $sp^2$, como mostra Fig.(8). Sua estrutura pode ser vista como uma rede triangular com uma base de dois átomos por célula unitária. Isso implica que precisamos de dois pontos e dois vetores para

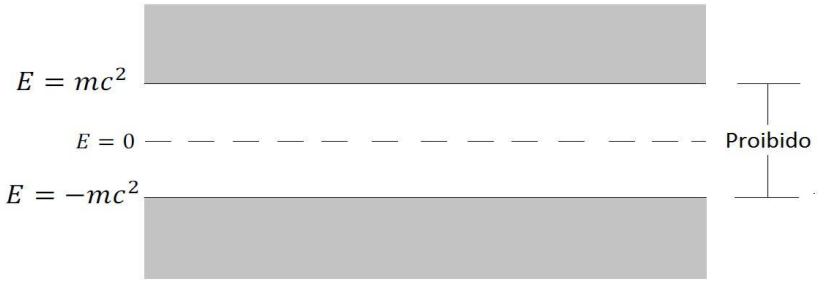


Figura 7: Os valores permitidos e proibidos de $E$ para partículas livres

obtermos qualquer ponto da rede (essa é uma das principais características que levam ao aparecimento de férmions de Dirac no grafeno, como veremos adiante). Os vetores da rede podem ser escritos como

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3,\sqrt{3}), \qquad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3,-\sqrt{3}) \tag{4.37}$$

onde $a \approx 1{,}42$Å é a distância entre os carbonos. Olhando para a rede recíproca (Fig.8), vemos que a primeira zona de Brillouin também é hexagonal e os vetores da rede recíproca são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1,\sqrt{3}), \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1,-\sqrt{3}) \tag{4.38}$$

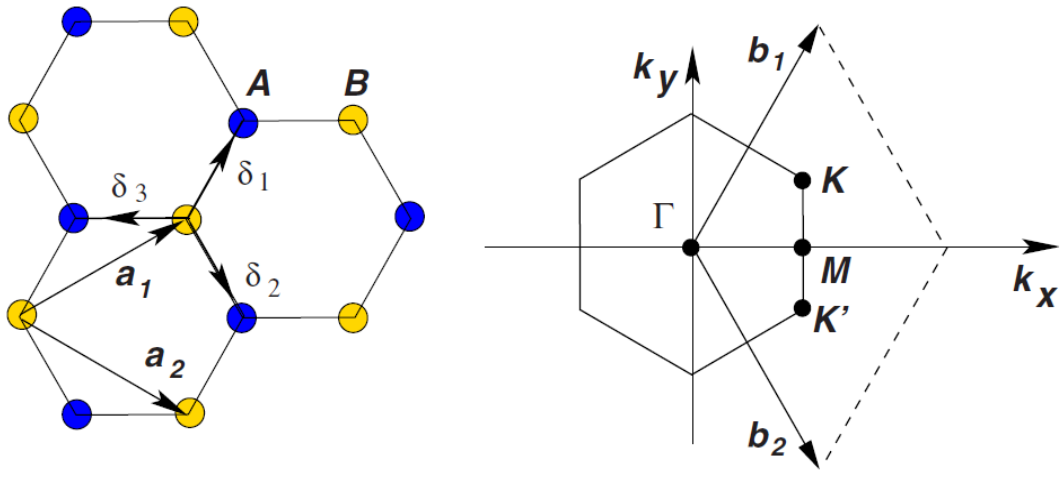


Figura 8: Estrutura hexagonal do grafeno e a zona de Brillouin. À esquerda temos a estrutura de rede do grafeno composta por duas sub-redes triangulares $A$ e $B$. $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são os vetores da rede e $\delta_i$, $i = 1{,}2{,}3$ são os vetores que ligam um átomo ao seu primeiro vizinho. À direita é mostrado a primeira zona de Brillouin. $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ são os vetores da rede recíproca e os cones de Dirac estão localizados nos pontos $K$ e $K'$.(Fonte: referência [14])

Na estrutura de bandas do grafeno [ver Fig.(9)], a banda de condução toca a banda

de valência em seis pontos na primeira zona de Brillouin, mas apenas dois desses pontos são independentes, que são os pontos $K$ e $K'$ vistos na Fig.(8), os outros pontos são equivalentes a estes. Os pontos $K$ e $K'$ são de grande importância física, como veremos adiante. Esses pontos são chamados de pontos de Dirac. Suas posições no espaço dos momentos são

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \qquad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \tag{4.39}$$

Considerando um modelo de ligação forte (*tight-binding*) para os elétrons no grafeno, onde eles só podem saltar para os primeiros e segundos átomos vizinhos, podemos escrever o hamiltoniano na forma

$$H = -t \sum_{\langle i,j\rangle,\sigma} (a^{\dagger}_{\sigma,i} b_{\sigma,j} + b^{\dagger}_{\sigma,i} a_{\sigma,j}) - t' \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma} (a^{\dagger}_{\sigma,i} a_{\sigma,j} + b^{\dagger}_{\sigma,i} b_{\sigma,j} + a^{\dagger}_{\sigma,j} a_{\sigma,i} + b^{\dagger}_{\sigma,j} b_{\sigma,i}) \tag{4.40}$$

onde $a_{i,\sigma}(a^{\dagger}_{i,\sigma})$ aniquila (cria) um elétron com spin $\sigma(\sigma = 1/2, -1/2)$ no sítio $\vec{R}_i$ na sub-rede $A$. Para a sub-rede $B$ temos uma definição semelhante com os operadores $b_{i,\sigma}$. O parâmetro $t$ é a energia para um elétron saltar para um átomo vizinho mais próximo e é dado aproximadamente por $t \approx 2{,}8eV$ e o parâmetro $t'$ é a energia para um elétron saltar para o segundo átomo vizinho mais próximo, dado por $0{,}02t \leq t' \leq 0{,}2t$ [70]. Quem primeiro estudou a estrutura eletrônica do grafeno a partir desse hamiltoniano foi Wallace em 1947 [15], que queria estudar grafite e considerou como uma primeira aproximação negligenciar as interações entre os planos. Ele começou analisando o caso 2D, que é o grafeno. Ele obteve a seguinte estrutura de bandas

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}) \tag{4.41}$$

onde

$$f(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_y a) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) . \tag{4.42}$$

O sinal positivo indica a banda de condução e o sinal negativo a banda de valência. Podemos perceber que quando $t'$ é igual a zero, o espectro é simétrico em torno da energia zero. Isso implica na existência de uma simetria entre elétron e buraco. Quando $t'$ tem valores finitos, essa simetria é quebrada e as bandas de condução e de valência ficam assimétricas. Na Fig.(9) temos a estrutura de bandas do grafeno com $t$ e $t'$ diferentes de zero. Podemos ver nesta mesma figura uma amplificação da região da banda de energia próxima a um ponto de Dirac. Para se obter a relação de dispersão na região próxima ao ponto de Dirac, deve-se expandir o espectro (4.41) em torno dos pontos $K$ e $K'$. Fazendo

$\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$, com $\mid \vec{q} \mid \ll \mid \vec{K} \mid$, temos

$$E_{\pm}(\vec{q}) \approx \pm v_F \mid \vec{q} \mid + O[(q/K)^2], \tag{4.43}$$

onde $\vec{q}$ é o momento medido relativo ao ponto de Dirac e $v_F$ é a velocidade de Fermi dada por $v_F = 3ta/2$, com um valor de $v_F \simeq 1 \times 10^6 m/s$.

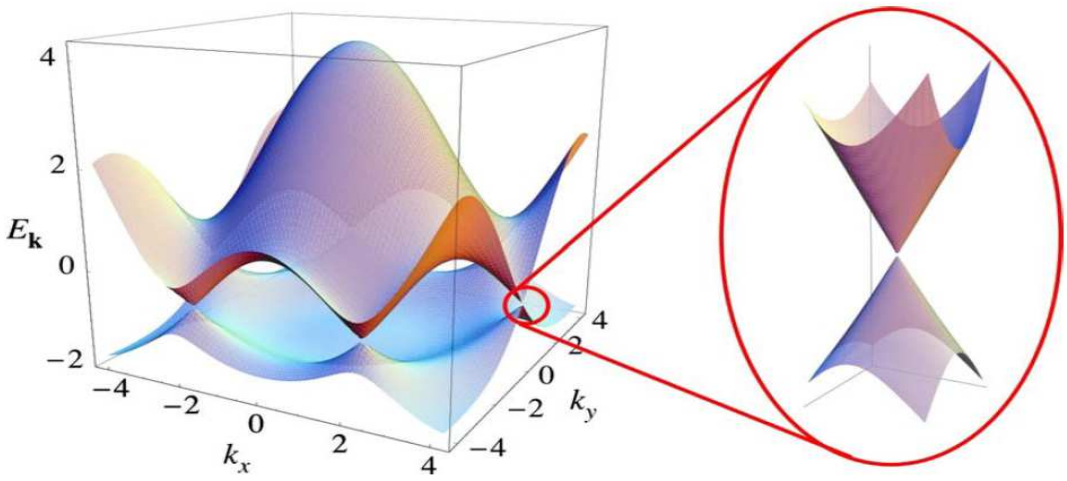


Figura 9: Dispersão eletrônica do grafeno obtido a partir do modelo de ligação forte com $t = 2{,}7$eV e $t' = -0{,}2t$. No lado direito temos um zoom na banda de energia próxima a um dos pontos de Dirac, mostrando o espectro cônico linear sem *gap*. (Fonte: referência [14])

Essa relação de dispersão linear torna o grafeno distinto dos demais sistemas em matéria condensada. Nos casos usuais, como foi visto nos capítulos anteriores, temos uma relação quadrática entre energia e momento dada por $E(\vec{q}) = q^2/2m^*$, onde $m^*$ é a massa efetiva dos portadores de carga, que leva a uma velocidade de Fermi da forma $v_F = q/m^* = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$. Dessa forma, a velocidade de Fermi varia consideravelmente com a energia, o que não acontece no grafeno, onde a velocidade de Fermi é constante e não depende da energia dos portadores de carga. Outra consequência dessa relação linear entre energia e momento é que os portadores de carga no grafeno para longos comprimentos de onda (ou baixas energias ) não são descritos pela equação de Schrödinger, como acontece quando temos uma relação de dispersão quadrática, mas por uma equação de Dirac efetiva em (2+1) dimensões para partículas de massa nula. Para obtermos essa teoria efetiva, vamos considerar o hamiltoniano (4.40) com $t' = 0$ e a transformada de Fourier dos operadores de aniquilação

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} a(\vec{k}) \, , \tag{4.44}$$

onde $N_c$ é o número de células unitárias e o índice $n$ indica a posição dos átomos na rede.

Usando essa transformação, podemos escrever o campo $a_n$ como a soma de dois termos, que vem da expansão da soma de Fourier em torno dos dois pontos $K$ e $K'$. Estamos interessados em estados de baixa energia, por isso a expansão é feita em torno dos pontos de Dirac. Com isso, o campo $a_n$ será representado como a soma de dois novos campos na forma

$$a_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} a_{1,n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} a_{2,n}(\vec{q}') \tag{4.45}$$

onde os índices 1 e 2 se referem aos dois pontos de Dirac $K$ e $K'$, respectivamente. Para a sub-rede $B$, também temos uma expansão semelhante dada por

$$b_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} b_{1,n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} b_{2,n}(\vec{q}') \tag{4.46}$$

O procedimento para se obter uma teoria efetiva válida próxima aos pontos de Dirac consiste em utilizar as representações (4.45) e (4.46) no hamiltoniano (4.40) com $t' = 0$ e expandir os operadores até ordens lineares em $\vec{\delta}_i$, $i = 1,2,3$, que são os três vetores que ligam um átomo aos seus primeiros vizinhos no espaço real dados por [ver Fig.(8)]

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1,\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1,-\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = -a(1,0)\ . \tag{4.47}$$

Considerando o fato que $\sum_{\vec{\delta}} e^{\pm\vec{K}\cdot\vec{\delta}} = \sum_{\vec{\delta}} e^{\pm\vec{K}'\cdot\vec{\delta}} = 0$, o hamiltoniano (4.40) fica

$$H = -i\hbar v_F \int dxdy \left[\psi_1^\dagger(\vec{r})\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r}) + \psi_2^\dagger(\vec{r})\vec{\sigma}^*\cdot\vec{\nabla}\psi_2(\vec{r})\right]\ , \tag{4.48}$$

onde as matrizes de Pauli são dadas por $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\vec{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ e os spinores $\psi_i = (a_i, b_i)^T$ e $\psi_i^\dagger = (a_i^\dagger, b_i^\dagger)$, com $i = 1,2$. Podemos ver que o hamiltoniano efetivo (4.48) é composto de uma soma de duas cópias do hamiltoniano tipo Dirac sem massa, um para momentos próximos ao ponto $K$ e outro para momentos em torno de $K'$.

Neste hamiltoniano de Dirac efetivo temos a velocidade de Fermi em vez da velocidade da luz, que aparece no operador de Dirac verdadeiro. A velocidade da luz é uma velocidade limite e também é invariante, o que não é verdade quando estamos falando da velocidade de Fermi dos portadores de carga. Portanto, temos que ter cuidado quando dizemos que os portadores de carga no grafeno são descritos por uma equação de onda relativística, pois a velocidade de Fermi faz com que a equação de Dirac deixe de ser covariante. Mas como estamos falando em uma teoria efetiva, isso não tem nenhuma consequência física.

Considerando uma linguagem de função de onda que descreve um único portador de carga, temos que os portadores de carga com momento próximos ao ponto $K$ são descritos

pela equação de Dirac efetiva

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\psi = E\psi \ , \tag{4.49}$$

onde as autoenergias são dadas por $E = \pm\hbar v_F q$.

Podemos escrever o hamiltoniano (4.48) como

$$H = -i\hbar v_F \tau_z \otimes \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \ . \tag{4.50}$$

Desta forma temos cada componente do spinor que descreve uma subrede ganhando mais duas componentes referentes ao grau de liberdade dos dois pontos de Dirac. Podemos identificar dois pseudospins no grafeno. Um pseudospin da subrede que é representado pelas matrizes de Pauli $\sigma_i$, onde o "spin up" corresponde à componente de uma subrede e o "spin down" corresponde à outra subrede. O outro pseudospin esta relacionado com o grau de liberdade dos pontos de Dirac e é chamada de pseudospin de vale. Ele é representado pelas matrizes de Pauli $\tau_i$. Nos próximos capítulos usaremos o hamiltoniano efetivo de Dirac para estudarmos sistemas físicos envolvendo grafeno, nanotubos de carbono e fulerenos.

Outras propriedades físicas importantes e as possíveis aplicações em diferentes áreas que tornam o grafeno um material muito interessante podem ser encontrados nos artigos de revisão [14, 71, 72, 73].

## 4.4 Isolantes Topológicos

Os isolantes topológicos são um novo estado da matéria que não podem ser conectados adiabaticamente com isolantes e semicondutores convencionais. Eles são caracterizados por serem isolantes no interior (*bulk*) e possuírem estados metálicos protegidos na superfície ou borda. Isso é possível devido a combinação da interação spin-órbita e a simetria de Reversão Temporal. Esse novo estado da matéria foi previsto teoricamente e depois foi observado em diferentes sistemas, que incluem casos bidimensionais e tridimensionais.

Para entendermos bem os isolantes topológicos, vamos começar falando sobre isolantes convencionais e também sobre o efeito Hall quântico, que foi o primeiro estado da matéria a possuir um *gap* de energia no interior e não ser topologicamente equivalente ao vácuo. Depois iremos considerar o isolante topológico em 2 e 3 dimensões.

O estado isolante é o estado mais básico da matéria. O isolante mais simples que

existe é o isolante atômico, onde todos os elétrons estão ligados aos seus átomos em camadas fechadas. Os isolantes são eletricamente inertes pois, para deslocar um elétron, é necessário uma quantidade considerável de energia. Utilizando a teoria de bandas, podemos dizer que em um isolante existe um *gap* de energia separando os estados ocupados na banda de valência dos estados vazios na banda de condução. Na Figura (10) temos um esquema da estrutura de bandas de um isolante.

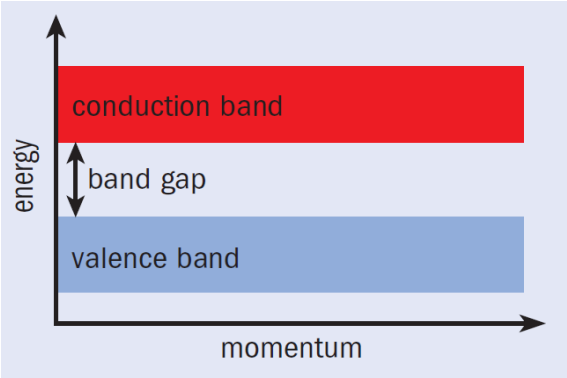


Figura 10: Estado isolante da matéria. Temos aqui a estrutura de bandas de um isolante, onde existe um *gap* de energia entre a banda de valência e a banda de condução. Fonte: [74]

Os semicondutores, assim como os isolantes, também possuem um *gap* de energia entre as bandas de valência e de condução, mas esse *gap* é bem menor que nos isolantes. Mas, em certo sentido, os semicondutores e os isolantes têm a mesma fase. Pode-se imaginar um processo que deforme continuamente o hamiltoniano de um no hamiltoniano do outro sem fechar o *gap*. Esse processo define uma equivalência topológica entre diferentes estados isolantes. Se adotarmos esse esquema de classificação topológica, todos os isolantes convencionais são equivalentes. Tais isolantes são equivalentes ao vácuo, que de acordo com a teoria quântica relativística de Dirac tem um *gap* de energia para a produção de um par elétron-pósitron. Porém, nem todos os estados com *gap* são equivalentes ao vácuo. O primeiro exemplo onde isso acontece é no estado Hall quântico inteiro (EHQI).

O estado Hall quântico inteiro ocorre quando elétrons são confinados em duas dimensões na presença de um forte campo magnético. O campo magnético leva aos níveis de Landau quantizados com energia $E_m = \hbar\omega_c(m+1/2)$, onde $\omega_c$ é a frequência ciclotron das órbitas circulares dos elétrons e $m$ é um inteiro. Se temos $N$ níveis de Landau ocupados e os estados restantes estão vazios, temos um *gap* de energia separando os estados ocupados dos estados vazios, como em um isolante. Mas, diferente de um isolante, quando um campo elétrico é aplicado as órbitas de cíclotron se espalham, levando a uma corrente

Hall que é caracterizada por uma condutividade Hall quantizada dada por

$$\sigma_{xy} = N\frac{e^2}{\hbar} \ . \tag{4.51}$$

A diferença entre um isolante convencional e o estado Hall quântico é de ordem topológica. Para entendermos melhor a ideia de um invariante topológico vamos considerar uma superfície 2D. Em tal superfície é possível definir a curvatura gaussiana $k$, que pode ser positiva, negativa ou nula. Para superfícies fechadas (sem bordas), o teorema de Gauss-Bonnet nos diz que a integral da curvatura gaussiana é um invariante topológico quantizado, e está relacionado com o genos $g$. O genos conta o "número de buracos na superfície" e é invariante por deformações suaves da superfície, onde suave significa qualquer deformação que não rasgue a superfície.

O invariante topológico que distingue um isolante convencional do estado Hall quântico foi explicado por Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs(TKNN)[37] e pode ser entendido fisicamente em termos da fase de Berry associada com as funções de onda de Bloch $|u_m(\vec{k})\rangle$. Berry mostrou que, quando o hamiltoniano de um sistema muda adiabaticamente em um caminho fechado no espaço dos parâmetros o sistema adquire uma fase bem definida dada pela integral de linha de $\vec{A}_m = i\langle u_m|\vec{\nabla}_k|u_m\rangle$. Isso pode ser escrito como uma integral de superfície do fluxo de Berry dado por $\vec{F}_m = \vec{\nabla} \times \vec{A}_m$. Associado à curvatura de Berry existe um invariante em um sólido que pode ser escrito como

$$n = \sum_{m=1}^{N} n_m \ , \tag{4.52}$$

onde

$$n_m = \frac{1}{2\pi}\int d^2k F_m \ . \tag{4.53}$$

$n$ é um inteiro quantizado e é um invariante topológico. A condição para ele ser quantizado é que haja um *gap* de energia entre os estados ocupados e os estados vazios. Ele é conhecido como o invariante TKNN, pois estes autores mostraram que a condutividade Hall $\sigma_{xy}$, computada usando a fórmula Kubo, tem a mesma forma que Eq.(4.51), mas com $N$ idêntico a $n$. A quantidade $n$ é um invariante topológico no sentido que ele não muda quando o hamiltoniano muda suavemente. Mudar suavemente aqui significa não fechar o *gap* de energia. Portanto, se considerarmos a interface entre um sistema Hall quântico com $n = 1$, por exemplo, e o vácuo, que possui $n = 0$, para que o invariante $n$ mude de valor é necessário que o *gap* de energia seja fechado e tenhamos estados metálicos na interface [Fig. 11]. Esses estados da borda se propagam em apenas uma direção, fazendo com que eles não possam ser espalhados por impurezas. Normalmente os elétrons podem

ser espalhados, fazendo com que eles se movam no sentido contrário, mas na interface mostrada na Fig. 11 temos transporte eletrônico sem dissipação de energia.

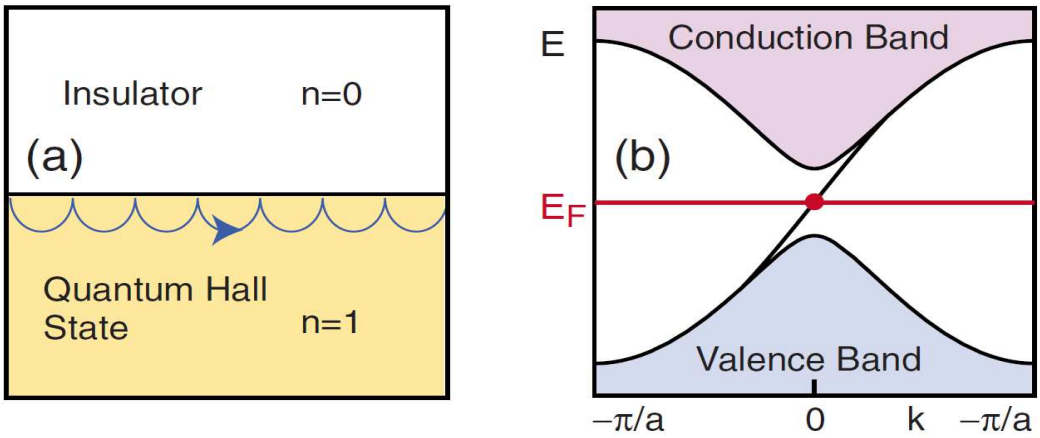


Figura 11: Interface entre um estado Hall quântico e um isolante convencional. (a) Os elétrons na interface que se propagam pulando de uma órbita de ciclotron para outra. (b) A estrutura de bandas, onde um estado da borda conecta a banda de condução com a banda de valência. Fonte: [75].

Um estado topológico diferente da matéria foi teoricamente predito para ocorrer em poços quânticos e posteriormente foi observado experimentalmente. Esse novo estado da matéria é conhecido como Estado Hall Quântico de Spin (EHQS) ou simplesmente isolante topológico bidimensional. O que caracteriza o isolante topológico é uma forte interação spin-órbita e a presença da simetria de reversão temporal.

A condutividade Hall quebra a simetria de reversão temporal ($T$), portanto o estado Hall quântico só existe quando não temos a simetria $T$. Contudo, a interação spin-órbita permite a existência de uma nova classe topológica de estruturas de bandas isolantes sem quebrar a simetria $T$. A simetria $T$ é representada pelo operador antiunitário dado por

$$\Theta = e^{i\pi S_y/\hbar}K \tag{4.54}$$

onde $S_y$ é o operador de spin e $K$ toma o complexo conjugado. Para spin 1/2, o operador $\Theta$ tem a propriedade $\Theta^2 = -1$. Isso tem uma importante consequência, conhecida como o teorema de Kramers, que diz que todos os autoestados de um hamiltoniano invariante por $T$ são pelo menos duplamente degenerados. Isso ocorre por que se existisse um estado $|\chi\rangle$ não degenerado, então $\Theta|\chi\rangle = c|\chi\rangle$, para alguma constante $c$. Isso implica em $\Theta^2|\chi\rangle = |c|^2|\chi\rangle$, o que não é permitido pois $|c^2| \neq -1$. Portanto, para um autoestado de energia $|n\rangle$ qualquer, o estado $\Theta|n\rangle$ também será um autoestado com a mesma energia. Quando não temos a interação spin-órbita, essa degenerescência é simplesmente entre as componentes *up* e *down* do spin.

Um hamiltoniano de Bloch invariante em $T$ deve satisfazer a condição

$$\Theta H(\vec{k})\Theta^{-1} = H(-\vec{k}) \; . \tag{4.55}$$

É possível classificar topologicamente todos os hamiltonianos de Bloch que possuem essa simetria e tem um *gap* de energia em duas classes topológicas. Como já foi dito anteriormente, a condutividade Hall quebra a simetria $T$, e portanto, o invariante TKNN é igual a zero para sistemas com essa simetria. Mas existe um outro invariante topológico que possui apenas dois valores possíveis, $\nu = 0$ ou 1. Para entendermos esse invariante topológico vamos olhar para a correspondência entre o interior e a borda de um material.

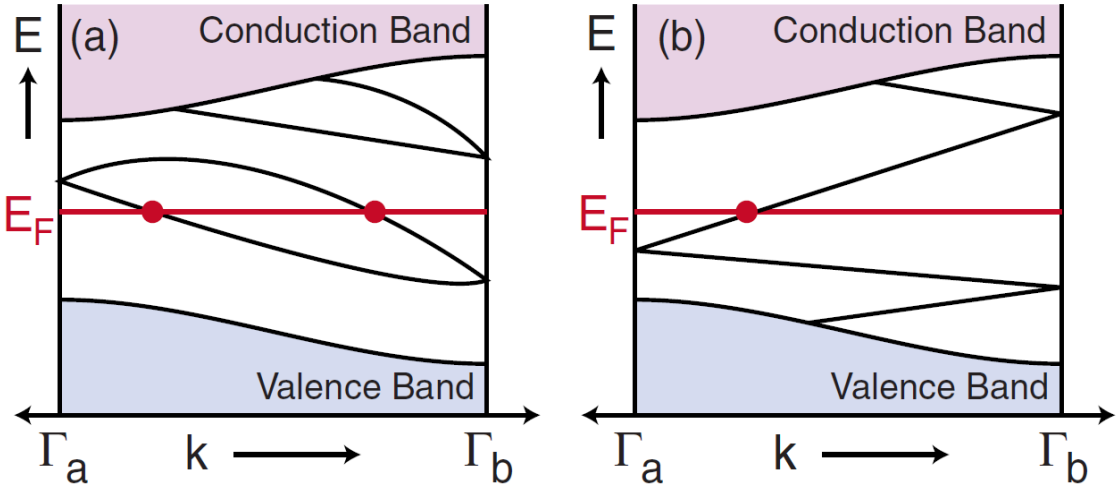


Figura 12: Dispersão eletrônica na região entre dois pontos da borda que possuem degenerescência de Kramers $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$. Em (a) os estados da borda cruzam a energia de Fermi $E_F$ um número par de vezes, enquanto que em (b) cruzam um número ímpar de vezes. Um número ímpar de cruzamentos leva a estados de borda protegidos topologicamente. Fonte: [75].

Na Fig. 12 temos os estados eletrônicos de um isolante 2D invariante por $T$, com um *gap* de energia separando as bandas de condução e valência e estados da borda na região do *gap*. Apenas metade da zona de Brilouin é mostrada na figura, pois devido à simetria $T$, a região $-\pi/a < k < 0$ é a imagem espelhada de $0 < k < \pi/a$. Dependendo da forma como os átomos se reorganizam na borda ou de modificações nas ligações químicas, os estados da borda na região do *gap* de energia podem existir ou não. Se eles existem, o teorema de Kramers diz que eles têm que ser pelo menos duplamente degenerados nos pontos $k = 0$ e $k = \pi/a$, nos outros pontos a interação spin-órbita quebra essa degenerescência. Na Fig. 12 vemos que existem duas possibilidades para os estados da borda em $k = 0$ e $k = \pi/a$ se conectarem. No primeiro caso à esquerda da figura, os estados de borda cruzam um número par de vezes a energia de Fermi. Nesse caso, esses estados da borda são frágeis

e sua existência depende da geometria e da química da borda, podendo ser facilmente eliminados. Na outra possibilidade os estados da borda cruzam a energia de Fermi um número ímpar de vezes. Neste caso, esses estados da borda são protegidos, não podendo ser eliminados.

Para cada banda cruzando a energia de Fermi em $k_x$, temos um par de Kramers degenerado em $-k_x$. Se o isolante possui um número par de pares de Kramers cruzando a energia de Fermi, ele encontra-se em uma fase topologicamente trivial com $\nu = 0$. Se cruzar um número ímpar, o isolante está no ESHQ, que é um estado topologicamente não trivial com $\nu = 1$. Diversas formulações matemáticas para o invariante topológico $\nu$ podem ser encontradas nas referências [43, 44, 45, 46].

O EHQS pode ser visto como duas cópias do EHQI, onde estados com spin opostos se propagam em sentidos contrários na borda do material. Na interface entre um EHQS e o vácuo [Fig.13] temos uma mudança no invariante topológico $\nu$, portanto temos estados metálicos na interface. Esses estados não podem ser localizados, nem na presença de desordem forte, contanto que a impureza não quebre a simetria de reversão temporal.

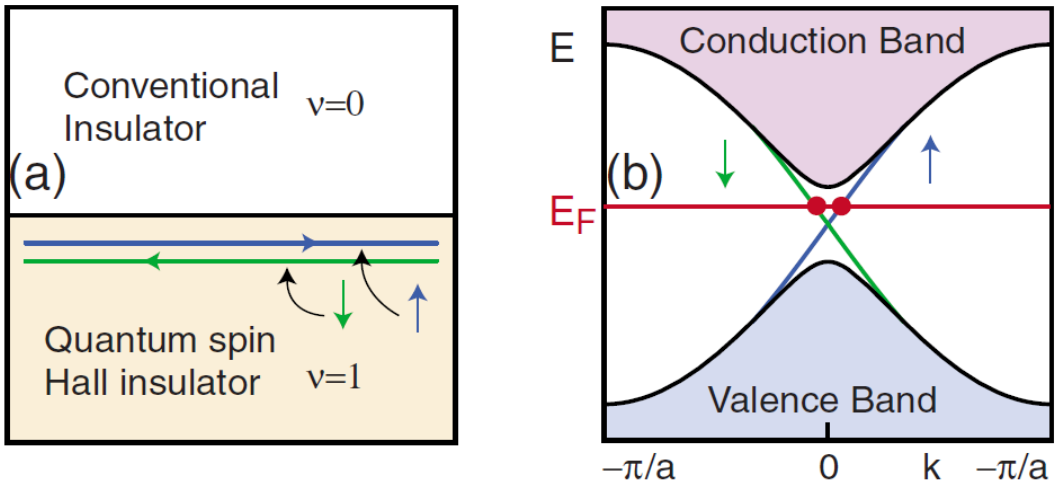


Figura 13: Estados da borda de um isolante Hall quântico de spin. Em (a) temos a interface entre um EHQS com $\nu = 1$ e o vácuo com $\nu = 0$. Existem estados metálicos na borda que são spin polarizados, isto é, partículas com spin up e down se propagam em sentidos opostos por dois canais de propagação conectados pela simetria de reversão temporal. Em (b) a estrutura de bandas do EHQS com os estados da borda é mostrado. Fonte: [75].

O primeiro estado de isolante topológico bidimensional obtido experimentalmente foi em poços quânticos de $HgTe$ intercalado entre $CdTe$ [38]. Ele havia sido anteriormente proposto teoricamente [76], onde se verificou que a espessura da camada de $HgTe$ deve ser superior a um valor crítico de $d_c \sim 6{,}5$nm. O modelo utilizado para descrever a estrutura

eletrônica dos poços quânticos de $HgTe/CdTe$ foi primeiramente introduzido na referência [76]. Explicitamente esse modelo é dado por

$$H(\vec{k}) = \epsilon(k)1_{4\times4} + \begin{pmatrix} M(k) & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -M(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(k) & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -M(k) \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

onde $\epsilon(k) = C + D(k_x^2 + k_y^2)$, $M(k) = M - B(k_x^2 + k_y^2)$ e os parâmetros $A$, $B$, $C$, $D$ e $M$ dependem da geometria do poço quântico. O espectro de energia do *bulk* é dado por

$$E_\pm = \epsilon(k) \pm \sqrt{A^2(k_x^2 + k_y^2) + M^2(k)}\ , \quad (4.57)$$

enquanto que o hamiltoniano efetivo que descreve os estados da borda é dado por

$$H_{borda} = Ak_y\sigma^z\ . \quad (4.58)$$

Para poços quânticos de $HgTe$, $A \simeq 3{,}6\text{eV}\cdot\text{Å}$ e a velocidade dos estados da borda é dada por $v = A/\hbar \simeq 5{,}5 \times 10^5\text{m/s}$.

Em 2006 três grupos teóricos independentes descobriram que o EHQS pode ser generalizado para três dimensões [39, 40, 41]. Depois disso, essa fase foi predita para existir em vários outros materiais reais [77]. A confirmação experimental veio em 2008 [42].

Para o isolante topológico bidimensional vimos que existe o invariante $Z_2$ $\nu$ que distingue o IT de um isolante trivial. Para o caso 3D, existem quatro invariantes $Z_2$ $(\nu_0;\nu_1,\nu_2,\nu_3)$, tal que cada um pode ter dois valores distintos, 0 ou 1. Isso faz com que existam dezesseis fases topológicas distintas, mas apenas o invariante $\nu_0$ é robusto na presença de desordem, fazendo com que exista apenas duas fases topológicas distintas. Neste caso, quando $\nu_0 = 0$, temos o isolante topológico fraco ou trivial, que pode ser obtido empilhando várias camadas de IT bidimensionais criando uma estrutura 3D. Para $\nu_0 = 1$ temos o isolante topológico forte ou simplesmente isolante topológico. Os invariantes $(\nu_1,\nu_2,\nu_3)$ podem ser interpretados como os índices de Miller indicando a orientação da rede.

O modelo efetivo para isolantes topológicos 3D proposto em [78] é válido para o $Bi_2Se_3$, $Bi_2Te_3$ e $Sb_2Te_3$, variando apenas por um ajuste de parâmetros. Mantendo

apenas termos lineares e quadráticos no momento $\vec{k}$, o hamiltoniano efetivo é dado por

$$H(\vec{k}) = \epsilon(k)1_{4\times4} + \begin{pmatrix} M(k) & AK_z & 0 & A_2k_- \\ A_1k_z & -M(k) & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & M(k) & -A_1k_z \\ A_2k_+ & 0 & -A_1k_+ & -M(k) \end{pmatrix}, \tag{4.59}$$

onde $K_\pm = K_x \pm ik_y$, $\epsilon(k) = C + D_1k_z^2 + D_2k_\perp^2$ e $M(k) = M - B_1k_z^2 - B_2k_\perp^2$. Os parâmetros dependem dos detalhes do material e podem ser determinados ajustando o espectro de energia do hamiltoniano efetivo com resultados obtidos de cálculos *ab initio* [79, 78].

Os estados da superfície podem ser obtidos projetando o hamiltoniano do *bulk* nos estados de superfície. No caso mais simples, onde temos apenas um ponto de Dirac, os estados da superfície podem ser descritos pelo hamiltoniano

$$H_{sup} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} . \tag{4.60}$$

onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli caracterizando o spin real dos estados superficiais.

## 4.5 Conclusões

Neste capítulo revisamos a equação de Dirac, que descreve elétrons relativísticos e mostramos como ela é utilizada de foram efetiva para descrever portadores de carga no grafeno e nos isolantes topológicos. Para o grafeno, a equação de Dirac efetiva descreve estados eletrônicos de baixa energia, onde existe uma relação de dispersão linear semelhante a de férmions de Dirac sem massa. Existem dois *pseudospins*, um relacionado com as duas subredes na estrutura da rede do grafeno e outro relacionado com os dois pontos de Dirac na estrutura de bandas. Para os isolantes topológicos tridimensionais, a equação de Dirac descreve os estados da superfície, que são protegidos topologicamente, e diferente do grafeno, não existe os *pseudospins*.

# 5 *Equação de Dirac Efetiva com Termo de Massa Variável*

## 5.1 Introdução

O grafeno tem mostrado grande potencial de aplicabilidade e é considerado como a base para a nova geração de dispositivos eletrônicos. Como vimos, o grafeno é caracterizado por um *gap* nulo em seu espectro de energia e um dos requisitos para se construir alguns dispositivos eletrônicos com esse material é a abertura de um *gap* em sua estrutura eletrônica. Isso pode ser feito de diferentes maneiras, como por exemplo com dopagem ou devido ao substrato. Com um *gap* de energia, a relação de dispersão se torna $E = \pm\sqrt{v_F^2 p^2 + \Delta^2}$, onde $2\Delta$ é o valor do *gap* e nós temos agora férmions de Dirac massivos.

É bem conhecido que as propriedades eletrônicas do grafeno são afetadas por seu substrato. Por exemplo, um substrato de nitreto de boro hexagonal ($h$-BN) leva ao aparecimento de um *gap* de 53 meV na estrutura eletrônica do grafeno [33]. O crescimento epitaxial do grafeno em um substrato de SiC produz um *gap* de $\approx$ 0,26eV [34]. Outras propriedades eletrônicas importantes do grafeno que dependem do substrato são a velocidade de Fermi e a mobilidade eletrônica. Os resultados dos valores da velocidade de Fermi no grafeno em diferentes substratos podem ser encontrados na referência [35].

Tendo como motivação todas essas propriedades, nesse capítulo vamos investigar a estrutura eletrônica do grafeno em um substrato formado por uma heteroestrutura periódica composta por dois materiais diferentes. Na camada de grafeno teremos então um salto na velocidade de Fermi e no *gap* de energia nas posições correspondentes as junções entre os materiais que compõem o substrato. Com isso, teremos uma equação de Dirac efetiva com termo de *gap* (massa) e velocidade de Fermi dependentes da posição para descrever estados de baixa energia no grafeno. Nós encontramos a estrutura de minibandas induzida pelo substrato para um caso geral e mostramos explicitamente os resultados

para uma heteroestrutura de substrato formada de $h$-BN - SiC. O grafeno tem sido recentemente usado em heteroestruturas [80, 81] com diferentes aplicações. No nosso caso estamos olhando apenas para uma folha de grafeno, onde teremos uma heteroestrutura induzida pelo substrato.

## 5.2 O Modelo

Vamos começar generalizando o hamiltoniano de Dirac efetivo bidimensional para estados de baixa energia no grafeno para o caso onde a velocidade de Fermi e o termo de *gap* dependem da posição. Primeiramente escrevemos

$$\left[-\imath\hbar v_F(x)(\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y) + \tau\Delta(x)\sigma_z\right]\psi = E\psi, \tag{5.1}$$

onde $\sigma_i$ são as matrizes de Pauli atuando nas duas subredes do grafeno, $v_F(x)$ é a velocidade de Fermi que agora depende da posição, $\Delta(x)$ é o termo de *gap*, $\tau = +1(-1)$ para os dois vales $\mathbf{K}(\mathbf{K}')$ e o spinor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A(x,y) \\ \psi_B(x,y) \end{pmatrix}, \tag{5.2}$$

com $A$ e $B$ representando as duas polarizações do *pseudospin* que correspondem as duas subredes do grafeno.

Como a velocidade de Fermi e o termo de massa dependem da posição, eles são operadores e não comutam como o operador momento linear. Portanto, para termos um hamiltoniano hermitiano devemos considerar a permutação entre os operadores no primeiro termo do operador de Dirac efetivo. Dessa forma, Eq.(5.1) pode ser escrita como

$$-\imath\hbar\left(\frac{\sigma_x}{2}[v_F(x)\partial_x + \partial_x v(x)]\sigma_y\partial_y\right)\psi\tau\Delta(x)\sigma_z\psi = E\psi. \tag{5.3}$$

Escrevendo

$$\psi = e^{-ik_y y}\begin{pmatrix} \psi_A(x) \\ \psi_B(x) \end{pmatrix} \tag{5.4}$$

e substituindo em (5.3), nós temos duas equações acopladas

$$-\frac{\imath\hbar}{2}\left[v(x)\frac{\partial}{\partial_x} + \frac{\partial}{\partial_x}v_F(x)\right]\psi_B i\hbar v(x)k_y\psi_B = (E - \tau\Delta(x))\psi_A \tag{5.5}$$

e

$$-\frac{\imath\hbar}{2}\left[v(x)\frac{\partial}{\partial_x}+\frac{\partial}{\partial_x}v_F(x)\right]\psi_A i\hbar v(x)K_y\psi_A=(E+\tau\Delta(x))\psi_B. \tag{5.6}$$

Desacoplando essas equações, podemos obter

$$-\frac{\hbar^2}{4}\left\{v_F\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{E-\tau\Delta}\left(v_F\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v_F\right)-\frac{2vk_y}{E-\tau\Delta}\right]+\frac{\partial}{\partial x}v_F\left[\frac{1}{E-\tau\Delta}\left(v_F\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v_F\right)-\frac{2vk_y}{E-\tau\Delta}\right]+\left[\frac{2vk_y}{E-\tau\Delta}\left(v\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v\right)-\frac{4v^2k_y^2}{E-\tau\Delta}\right]\right\}\psi_B=(E+\tau\Delta)\psi_B \tag{5.7}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{4}\left\{v_F\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{E+\tau\Delta}\left(v_F\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v_F\right)+\frac{2vk_y}{E+\tau\Delta}\right]+\frac{\partial}{\partial x}v_F\left[\frac{1}{E+\tau\Delta}\left(v_F\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v_F\right)+\frac{2vk_y}{E+\tau\Delta}\right]-\left[\frac{2vk_y}{E+\tau\Delta}\left(v\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}v\right)+\frac{4v^2k_y^2}{E+\tau\Delta}\right]\right\}\psi_A=(E-\tau\Delta)\psi_A \tag{5.8}$$

Na próxima seção vamos usar as Eqs.(5.7) e (5.8) para obtermos a estrutura eletrônica do grafeno depositado em uma heteroestrutura periódica de substratos composta por dois materiais diferentes.

## 5.3 Grafeno em uma heteroestrutura de substrato

Nesta seção vamos utilizar o hamiltoniano efetivo de Dirac obtido na última seção para descrevermos elétrons em uma folha de grafeno depositado em uma heteroestrutura periódica de substrato. Na heteroestrutura que estudamos anteriormente, os portadores de carga são descritos como sendo partículas livres com uma massa efetiva dependendo da posição. Neste novo caso, temos um operador de Dirac efetivo com velocidade de Fermi e termo de *gap* variável, para levar em conta a influência do substrato na camada de grafeno.

Nós consideramos o grafeno depositado no substrato mostrado na Fig.(14). Vamos primeiramente resolver o caso geral, sem especificar os materiais que compõem o substrato, obteremos as condições de contorno na interface e a superrede de minibandas e então mostraremos o resultado para o grafeno em uma heteroestrutura de substrato de *h*-BN - SiC.

Como o hamiltoniano é periódico, a função de onda satisfaz o teorema de Bloch, então

$$\psi(x+n(a+b))=e^{iKn(a+b)}\psi(x) \tag{5.9}$$

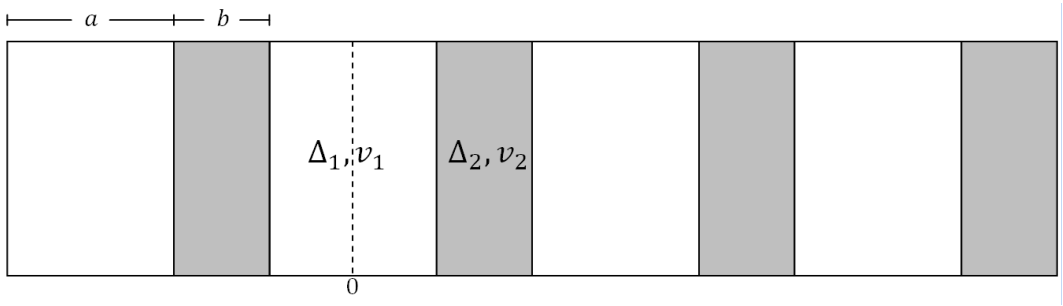


Figura 14: A heteroestrutura periódica de substrato. Cada cor representa um material diferente que irá induzir um diferente valor de *gap* e de velocidade de Fermi na folha de grafeno.

e

$$\psi'(x + n(a + b)) = e^{iKn(a+b)}\psi'(x) \ , \tag{5.10}$$

onde $K$ é o número de onda de Bloch e $n$ é um inteiro. Devido a isso, podemos reduzir o problema a célula unitária $0 \leq x \leq a + b$ [ver Fig.(14)]. Agora precisamos das condições nas interfaces $x = \frac{a}{2}$ e $x = \frac{a}{2} + b$.

Para encontramos as condições na interface vamos considerar a interface mostrada na Fig.(15).

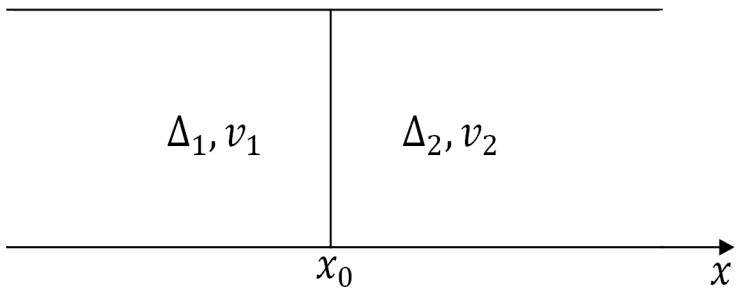


Figura 15: Uma interface no grafeno com diferente *gap* de energia e velocidade de Fermi.

Nesta interface nós temos que

$$v(x) = v_1 H(x_0 - x) + v_2 H(x - x_0) \tag{5.11}$$

e

$$\Delta(x) = \Delta_1 H(x_0 - x) + \Delta_2 H(x - x_0) \tag{5.12}$$

onde $H$ é a função de Heaviside. Usando as propriedades

$$f(x)\delta(x - x_0) = \frac{f(x_0+) + \psi(x_0-)}{2} f(x - x_0), \tag{5.13}$$

e

$$f(x)\delta'(x-x_0) = \frac{f(x_0+)+f(x_0-)}{2}\delta'(x-x_0) - \frac{f'(x_0+)+f'(x_0-)}{2}\delta(x-x_0), \quad (5.14)$$

nós podemos escrever a equação (5.7) como

$$\frac{4v_F^2}{E-\tau\Delta}\psi_B'' + \left(\frac{v_2}{E-\tau\Delta_2} - \frac{v_1}{E-\tau\Delta_1}\right)(v_2\psi_B'^{+} + v_1\psi_B'^{-})\delta(x-x_0) + \frac{(v_2^2-v_1^2)}{4}\left(\frac{\psi_B^+}{E-\tau\Delta_2} + \frac{\psi^-}{E-\tau\Delta_1}\right)\delta'(x-x_0) + \left(\frac{v_2^2}{E-\tau\Delta_2} - \frac{v_1^2}{E-\tau\Delta_1}\right)(\psi_B'^{+} + \psi_B'^{-})\delta(x-x_0) + \frac{(v_2-v_1)}{2}\left(\frac{v_2\psi_B^+}{E-\tau\Delta_2} + \frac{v_1\psi_B^-}{E-\tau\Delta_1}\right)\delta'(x-x_0) - 2k_y\left[\left(\frac{v_2}{E-\tau\Delta_2} - \frac{v_1}{E-\tau\Delta_1}\right)\left(\frac{v_2\psi^+ + v_1\psi^-}{2}\right)\delta(x-x_0) + \left(\frac{v_2^2}{E-\tau\Delta_2} - \frac{v_1^2}{E-\tau\Delta_1}\right)\left(\frac{\psi^+ + \psi^-}{2}\right)\delta(x-x_0) + \frac{2v_2}{E-\tau\Delta}\psi'\right] + \frac{4k_y v^2}{E-\tau\Delta}\psi' + k_y(v_2-v_1)\left(\frac{v_2\psi^+}{E-\tau\Delta_2} + \frac{v_1\psi^-}{E-\tau\Delta_1}\right)\delta(x-x_0) - 4\frac{k_y^2 v^2}{E-\tau\Delta}\psi = -\frac{4}{\hbar^2}(E+\tau\Delta)\psi(x), \quad (5.15)$$

Integrando (5.15) de $x_0-\epsilon$ até $x_0+\epsilon$ [ver Fig.15] e fazendo $\epsilon\to 0$, nós obtemos

$$\begin{aligned}
&\psi'^{+}[4v_2^2(E-\tau\Delta_1) + (v_1^2 - v_1v_2)(E-\tau\Delta_2)] \\
&-\psi'^{-}[4v_1^2(E-\tau\Delta_2) + (v_2^2 - v_1v_2)(E-\tau\Delta_1)] \\
&+k_y[\psi^+ - \psi^-][v_2^2(E-\tau\Delta_1) - v_1^2(E-\tau\Delta_2) \\
&+v_1v_2\tau(\Delta_2-\Delta_1)] = 0\,. \qquad (5.16)
\end{aligned}$$

Para encontrarmos a condição de contorno para a função de onda, calculamos a *primitiva* de (5.15), integramos de $x_0-\epsilon$ to $x_0+\epsilon$ e olhamos para o limite $\epsilon\to 0$. A condição de contorno obtida é dada por

$$\psi_B^+ = \beta\psi_B^-\,, \qquad (5.17)$$

onde

$$\beta = \left(\frac{8v_1^2(E-\tau\Delta_2) + (11v_2^2 - v_1^2 - 2v_1v_2)(E-\tau\Delta_1)}{8v_2^2(E-\tau\Delta_1) + (11v_1^2 - v_2^2 - 2v_1v_2)(E-\tau\Delta_2)}\right)\,. \qquad (5.18)$$

Substituindo a condição (5.17) em (5.16), é possível escrever

$$\psi_B'^{+} = \alpha\psi_B'^{-} + \gamma\psi_B^-\,, \qquad (5.19)$$

onde

$$\alpha = \left(\frac{4v_1^2(E-\tau\Delta_2) + (v_2^2 - v_1v_2)(E-\tau\Delta_1)}{4v_2^2(E-\tau\Delta_1) + (v_1^2 - v_1v_2)(E-\tau\Delta_2}\right) \qquad (5.20)$$

e

$$\gamma = k_y(1+\beta)\left(\frac{v_2^2(E-\tau\Delta_1) - v_1^2(E-\tau\Delta_2) + v_1v_2\tau(\Delta_2-\Delta_1)}{4v_2^2(E-\tau\Delta_1) + (v_1^2 - v_1v_2)(E-\tau\Delta_2)}\right) . \tag{5.21}$$

Analogamente, resolvendo para $\psi_A$, encontramos

$$\psi_A'^{+} = \zeta\psi_A'^{-} + \eta\psi_A^{-} \tag{5.22}$$

e

$$\psi_A^{+} = \kappa\psi_A^{-} , \tag{5.23}$$

onde

$$\zeta = \left(\frac{4v_1^2(E+\tau\Delta_2) + (v_2^2 - v_1v_2)(E+\tau\Delta_1)}{4v_2^2(E+\tau\Delta_1) + (v_1^2 - v_1v_2)(E+\tau\Delta_2}\right) , \tag{5.24}$$

$$\eta = k_y(1+\beta)\left(\frac{v_1^2(E+\tau\Delta_2) - v_2^2(E+\tau\Delta_1) + v_1v_2\tau(\Delta_2-\Delta_1)}{4v_2^2(E+\tau\Delta_1) + (v_1^2 - v_1v_2)(E+\tau\Delta_2)}\right) \tag{5.25}$$

e

$$\kappa = \left(\frac{8v_1^2(E+\tau\Delta_2) + (11v_2^2 - v_1^2 - 2v_1v_2)(E+\tau\Delta_1)}{8v_2^2(E+\tau\Delta_1) + (11v_1^2 - v_2^2 - 2v_1v_2)(E+\tau\Delta_2)}\right) . \tag{5.26}$$

Então, o conjunto de condições de contorno para $\psi_B$ é dado por

$$\psi_B\left(\frac{a^+}{2}\right) = \beta\psi_B\left(\frac{a^-}{2}\right) , \tag{5.27}$$

$$\psi_B'\left(\frac{a^+}{2}\right) = \alpha\psi_B'\left(\frac{a^-}{2}\right) + \gamma\psi_B\left(\frac{a^-}{2}\right) , \tag{5.28}$$

$$\psi_B\left(\frac{a}{2}+b^+\right) = \mu\psi_B\left(\frac{a}{2}+b^-\right) , \tag{5.29}$$

$$\psi_B'\left(\frac{a}{2}+b^+\right) = \nu\psi_B'\left(\frac{a}{2}+b^-\right)\lambda\psi_B\left(\frac{a}{2}+b^-\right) , \tag{5.30}$$

$$\psi_B(a+b) = e^{iK(a+b)}\psi_B(0) \tag{5.31}$$

e

$$\psi_B'(a+b) = e^{iK(a+b)}\psi_B'(0) , \tag{5.32}$$

onde $\mu$, $\nu$ e $\lambda$ tem a mesma forma de $\beta$, $\alpha$ e $\gamma$, respectivamente, com a mudança de $v_1$ por $v_2$, $\Delta_1$ por $\Delta_2$ e vice-versa.

A solução geral de (5.7) é dada por

$$\psi_B = \begin{cases} A\cos k_1x + B\sin k_1x, & 0 \le x < \frac{a}{2} \\ C\cos k_2x + D\sin k_2x, & \frac{a}{2} \le x < \frac{a}{2}+b \\ E\cos k_1x + F\sin k_1x, & \frac{a}{2}+b \le x \le a+b \end{cases} , \tag{5.33}$$

onde $A$, $B$, $C$ $D$, $E$ e $F$ são coeficientes constantes e $k_i^2 = \frac{E^2-\Delta_i^2}{\hbar^2 v_i^2} - k_y^2$.

A derivada de (5.33) é dada por

$$\psi'_B = \begin{cases} -k_1 A \sin k_1 x + q_1 B \cos k_1 x, & 0 \leq x < \frac{a}{2} \\ -k_2 C \sin k_2 x + q_2 D \cos k_2 x, & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b \\ -k_1 E \sin k_1 x + q_1 F \cos k_1 x, & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} . \tag{5.34}$$

Substituindo a função de onda (5.33) e sua derivada (5.34) nas condições de contorno (5.27) - (5.32) nós obtemos um sistema com seis equações de onde podemos obter a relação

$$\begin{aligned} \cos K(a+b) &= \cos k_1 a \cos k_2 b \\ &- \frac{1}{2}\left[\mu\alpha\frac{k_1}{k_2} + \beta\nu\frac{k_2}{k_1} - \frac{\gamma\lambda}{k_1 k_2}\right] \sin k_1 a \sin k_2 b \\ &+ \frac{1}{2}\left[\frac{\gamma\mu + \beta\lambda}{k_1}\right] \sin k_1 a \cos k_2 b \\ &+ \frac{1}{2}\left[\frac{\alpha\lambda + \gamma\mu}{k_2}\right] \cos k_1 a \sin k_2 b \end{aligned} \tag{5.35}$$

O lado esquerdo da equação acima limita o lado direito ao intervalo $\pm 1$, dando valores permitidos e proibidos para a energia, ou seja, bandas e gaps de energia.

Na realidade, a relação (5.35) vai nos dar as minibandas e minigaps induzidas pela heteroestrutura de substrato na região entre $E_{c1}$ e $E_{c2}$, como mostra a Fig.(16), onde $E_{c1}$ e $E_{c2}$ é a energia mínima da banda de condução de cada material na heteroestrutura.

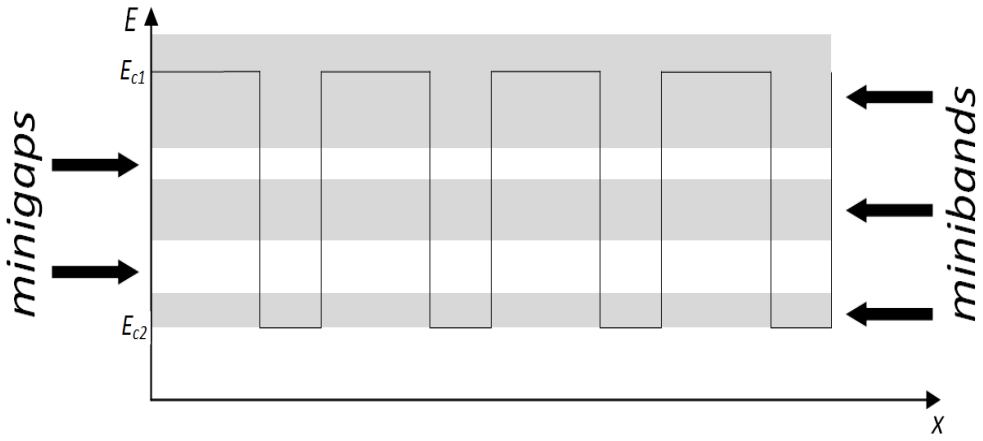


Figura 16: A banda de condução dos materiais na heteroestrutura em função da posição $x$. Na região entre a energia mínima da banda de condução de cada material $E_{c1}$ and $E_{c2}$ será induzido minibandas (cinza) e minigaps.

A relação (5.35) foi obtida da solução geral e das condições de contorno para $\psi_B$. Teremos uma relação semelhante a partir de $\psi_A$, mudando apenas os coeficientes das

condições de contorno. Como estamos interessados no movimento na direção $x$, podemos fazer $k_y = 0$. É fácil ver que $\alpha$ e $\beta$ com $\tau = 1(-1)$ é igual a $\zeta$ e $\kappa$ com $\tau = -1(1)$, respectivamente. Isso nos diz que precisamos obter apenas duas estruturas eletrônicas a partir relação (5.35), uma com $\tau = 1$ e outra com $\tau = -1$. As energias permitidas serão dadas pelas energias permitidas nas duas estruturas de bandas ao mesmo tempo, ou seja, se um valor de energia é permitido na relação (5.35) com $\tau = 1$ e proibido quando $\tau = -1$, esse valor de energia será proibido. Isso se deve ao fato de termos equações acopladas para $\psi_A$ e $\psi_B$.

Considerando uma heteroestrutura de substrato formada de $h$-BN - SiC, teremos que $v_1 = 1{,}49 \times 10^6$m/s, $v_2 = 1{,}15 \times 10^6$m/s, $\Delta_1 = 0{,}0265$eV e $\Delta_2 = 0{,}13$eV. Nas Fig. 17, 18 e 19 nós esboçamos na primeira zona de Brillouin o primeiro minigap para diferentes valores de $a$ e $b$, onde $a$ e $b$ são os tamanhos de cada material no substrato.

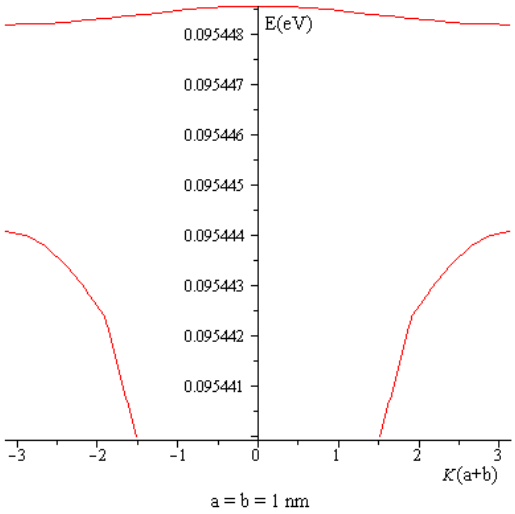


Figura 17: O primeiro minigap na primeira zona de Brillouin para o grafeno em uma heteroestruutra de substrato formada de $h$-BN - SiC. Para este gráfico consideramos $a = b = 1$nm.

Quando $a = b = 1$nm o primeiro minigap será de $4 \times 10^{-6}$eV. Quando $b = 1$nm e $a = 10$nm, teremos um minigap de $5{,}6 \times 10^{-5}$eV e para $a = 1$nm e $b = 10$nm, $3{,}6 \times 10^{-4}$eV.

## 5.4 Conclusões

Neste capítulo nós estudamos o grafeno em uma heteroestrutura de substrato formada por dois materiais diferentes. Esse substrato induz um salto na velocidade de Fermi e no *gap* de energia nas posições correspondentes as junções entre os materiais. Com isso, nós escrevemos a equação de Dirac efetiva com termo de *gap* e velocidade de Fermi

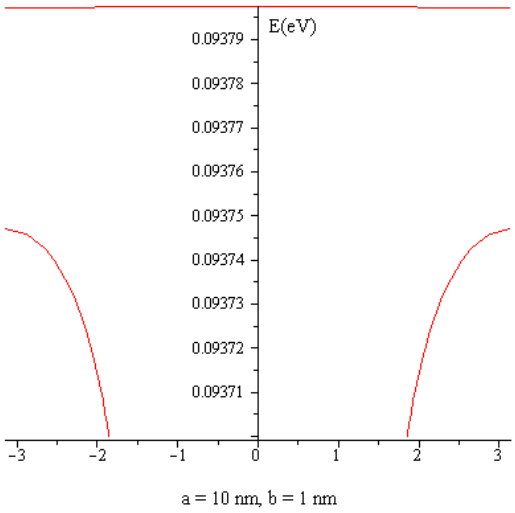


Figura 18: O primeiro minigap na primeira zona de Brillouin para o grafeno em uma heteroestruutra de substrato formada de $h$-BN - SiC. Para este gráfico consideramos $b = 1$nm e $a = 10$nm.

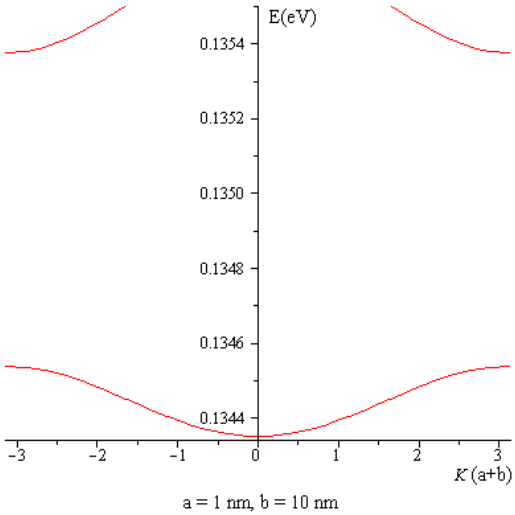


Figura 19: O primeiro minigap na primeira zona de Brillouin para o grafeno em uma heteroestruutra de substrato formada de $h$-BN - SiC. Para este gráfico consideramos $a = 1$nm e $b = 10$nm.

dependentes da posição, levando em conta que o operador de Dirac deve ser hermitiano. Nós usamos essa equação para encontrar a estrutura de minibandas no grafeno. Nós esboçamos na primeira zona de Brillouin o primeiro minigap para um substrato formado por $h$-BN - SiC. Nós mostramos três situações diferentes, variando o tamanho de cada material no substrato. Como heteroestruturas tem uma grande variedade de aplicações na eletrônica, nossos resultados aqui apresentados mostram uma nova possibilidade para utilizar o grafeno na criação de dispositivos eletrônicos.

# *Parte III*

# *Rotação em materiais topológicos*

# 6 *Dinâmica em um referencial girante*

## 6.1 Introdução

Os efeitos da rotação em partículas quânticas foram estudados tanto teoricamente quanto experimentalmente. Em 1979, por exemplo, Werner, Staudenmann e Colella [82] mediram uma fase na função de onda de nêutrons devido à rotação da Terra. Essa mesma fase foi estudada teoricamente por Aharonov e Carmi [83, 84] e Anandan [85]. Embora os efeitos não-inerciais devido à rotação em partículas quânticas tenham sido previstos e verificados experimentalmente, muito pouco se tem feito em relação a um portador de carga em um meio material girante. Para investigarmos os efeitos da rotação, precisamos primeiro estudar a dinâmica de uma partícula em um referencial girante. Neste capítulo vamos fazer esse estudo para uma partícula clássica, quântica e relativística.

## 6.2 A Hamiltoniana de uma partícula clássica

A lagrangiana geral para uma partícula em um referencial arbitrário, não necessariamente inercial, é dada por [86]

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^{\,2} + m\vec{v}\cdot(\vec{\Omega}\times\vec{r}) + \frac{1}{2}m(\vec{\Omega}\times\vec{r})^2 - m\vec{W}\cdot\vec{r} - U\ , \tag{6.1}$$

onde $U$ é a energia potencial. O segundo e o terceiro termo na lagrangiana acima surgem quando temos um referencial $K$ girando com velocidade angular $\vec{\Omega}$ em relação a um referencial inercial $K_0$. O penúltimo termo aparece quando estamos em um referencial $K'$ que se move com velocidade $\vec{V}$ em relação ao referencial inercial $K_0$, onde

$$\vec{W} = \frac{d\vec{V}}{dt}\ . \tag{6.2}$$

Como estamos interessados em estudar uma partícula clássica em um referencial girante ($\vec{V} = 0$), a lagrangiana nesse referencial será dada por

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^{\,2} + m\vec{v}\cdot(\vec{\Omega}\times\vec{r}) + \frac{1}{2}m(\vec{\Omega}\times\vec{r})^2 - U \ . \tag{6.3}$$

Substituindo a Lagrangiana (6.3) na equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \vec{v}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = 0 \ , \tag{6.4}$$

obtemos a equação de movimento dada por

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{r}\times\frac{d\vec{\Omega}}{dt} + 2m\vec{v}\times\vec{\Omega} + m\vec{\Omega}\times(\vec{r}\times\vec{\Omega}) - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \ . \tag{6.5}$$

Podemos ver que existem três forças inerciais devido a rotação. A primeira força dada por $m\vec{r}\times d\vec{\Omega}/dt$ será diferente de zero apenas quando a velocidade angular variar com o tempo. Quando a rotação for constante, ela será nula. Essa força é chamada de força de Euler. A força dada pelo termo $2m\vec{v}\times\vec{\Omega}$ é chamada de força de Coriolis. Essa força depende da velocidade da partícula. Se a partícula está em repouso no referencial girante, essa força será nula. A terceira força inercial dada por $m\vec{\Omega}\times(\vec{r}\times\vec{\Omega})$ é chamada de força centrífuga.

Vamos considerar o caso onde temos uma velocidade angular constante, ou seja, a força de Euler será zero. Nesse caso, o momento canônico será dado por

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + m(\vec{\Omega}\times\vec{r}) \ . \tag{6.6}$$

Como a hamiltoniana é dada por $H = \vec{p}\cdot\vec{v} - L$, obtemos

$$H = \frac{1}{2}m\vec{v}^{\,2} - \frac{1}{2}m(\vec{\Omega}\times\vec{r})^2 + U \ , \tag{6.7}$$

para uma partícula em um referencial girante.

A velocidade $\vec{v}$ da partícula relativa ao referencial $K$ que gira uniformemente está relacionada com a velocidade $\vec{v}_0$ relativa ao referencial inercial $K_0$ por

$$\vec{v}_0 = \vec{v} + \vec{\Omega}\times\vec{r} \ . \tag{6.8}$$

O momento linear (6.6) da partícula no referencial $K$ é, portanto, o mesmo que o momento $\vec{p}_0 = m\vec{v}_0$ no referencial $K_0$. Da mesma forma, o momento angular $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ é o mesmo nos dois referenciais. Contudo, a energia não é a mesma. Substituindo (6.8) em (6.7)

temos que

$$H = \frac{1}{2}m\vec{v}_0^{\,2} + U - m\vec{v}_0 \cdot (\vec{\Omega} \times \vec{r}) \ , \tag{6.9}$$

que podemos escrever como

$$H = H_0 - \vec{\Omega} \cdot \vec{L} \ . \tag{6.10}$$

A relação acima nos dá a lei de transformação na energia quando estamos em um referencial girante com velocidade angular constante.

## 6.3 O Hamiltoniano para uma partícula quântica

O operador hamiltoniano quântico pode ser escrito da mesma forma da função hamiltoniana clássica obtida na seção anterior, escrevendo apenas o momento linear e angular como operadores quânticos. Outra forma de obtermos o operador de energia de uma partícula quântica em um referencial girante é fazendo uma analogia com o eletromagnetismo. A força de Lorentz é dada pela soma da força elétrica e magnética, que são dadas por

$$\vec{F}_{ele} = q\vec{E} \tag{6.11}$$

e

$$\vec{F}_{mag} = \frac{q}{c}(\vec{v} \times \vec{B}) \ , \tag{6.12}$$

onde $\vec{E}$ e $\vec{B}$ são os campos elétrico e magnético, respectivamente, e $q$ é a carga elétrica da partícula. Das equações de Maxwell temos que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \ . \tag{6.13}$$

Isso implica que podemos construir um campo vetorial $\vec{A}$, que é chamado de potencial vetor eletromagnético, tal que

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \ . \tag{6.14}$$

Se consideramos que o campo magnético não varia com o tempo, podemos escrever também que

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 \ . \tag{6.15}$$

Isso significa que existe uma função escalar $\phi$, chamada de potencial escalar eletromagnético, tal que

$$\vec{E} = \vec{\nabla}\phi \ . \tag{6.16}$$

Por fim, o hamiltoniano de uma partícula quântica de carga $q$ na presença de um campo eletromagnético é dado por

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \ . \tag{6.17}$$

Da mesma forma como escrevemos o hamiltoniano acima, podemos obter o hamiltoniano para uma partícula de massa $m$ em um referencial girante. As forças inerciais, quando temos uma velocidade angular constante, são dadas por

$$\vec{F}_{cen} = -m\vec{\Omega} \times (\vec{\Omega} \times \vec{r}) \tag{6.18}$$

e

$$\vec{F}_{cor} = 2m(\vec{v} \times \vec{\Omega}) \ . \tag{6.19}$$

Considerando $\vec{\Omega}$ como um campo constante,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} = 0 \ , \tag{6.20}$$

existe um potencial vetor inercial $\vec{a}$ tal que,

$$\vec{\Omega} = \vec{\nabla} \times \vec{a} \ , \tag{6.21}$$

onde

$$\vec{a} = \frac{1}{2}(\vec{\Omega} \times \vec{r}) \ . \tag{6.22}$$

Como a força centrífuga é conservativa, existe um potencial escalar centrífugo tal que

$$\vec{F}_{cen} = -m\vec{\nabla}V \ , \tag{6.23}$$

onde

$$V = -\frac{1}{2}m(\vec{\Omega} \times \vec{r})^2 \ . \tag{6.24}$$

Desta forma, podemos escrever o hamiltoniano para uma partícula quântica em um referencial girante na forma

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - 2m\vec{a})^2 + mV \tag{6.25}$$

Substituindo o potencial vetor inercial e o potencial escalar centrífugo e expandindo o quadrado no hamiltoniano acima, temos que

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \vec{p} \cdot (\vec{\Omega} \times \vec{r}) \\ &= \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \vec{\Omega} \cdot \vec{L} \ , \end{aligned} \tag{6.26}$$

onde $\vec{L}$ é o momento angular orbital. Como esperado, obtemos o hamiltoniano escrito na

mesma forma da hamiltoniana clássica.

## 6.4 O Hamiltoniano de Dirac Relativístico

O Princípio de Equivalência, da Relatividade Geral, não distingue campo gravitacional de referencial acelerado (ou não inercial). Na relatividade geral, os efeitos inerciais e gravitacionais são expressados por uma métrica e uma conexão em um espaço-tempo curvo. Para obtermos o operador de Dirac para uma partícula relativística em um referencial girante, vamos começar escrevendo o elemento de linha em coordenadas curvilíneas. A transformação de coordenadas de um referencial inercial para um referencial girante é dado na forma

$$d\vec{r}\,' = d\vec{r} + (\vec{\Omega} \times \vec{r})dt \tag{6.27}$$

Portanto, o elemento de linha em um sistema de referência girante é dado por

$$\begin{aligned} ds^2 &= g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu \\ &= [-c^2 + (\vec{\Omega} \times \vec{r})^2]dt^2 + 2(\vec{\Omega} \times \vec{r})dtd\vec{r} + d\vec{r}^{\,2} \end{aligned} \tag{6.28}$$

Dessa forma, a métrica se torna

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 + \vec{u}^{\,2} & u_x & u_y & u_z \\ u_x & 1 & 0 & 0 \\ u_y & 0 & 1 & 0 \\ u_z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.29}$$

onde

$$\vec{u} = \frac{\vec{\Omega} \times \vec{r}}{c} \tag{6.30}$$

Podemos construir uma base local ortonormal de 1-formas $\{\theta^a = e^a_\mu dx^\mu\}$, onde $e^a_\mu$ é chamada de tetrada. A tetrada relaciona a base de coordenadas curvilíneas $\{dx^\mu\}$, que é chamada de base coordenada e é denotada pelos índices gregos, com a base local plana $\{\theta^a\}$, que é chamada de base não-coordenada e nós denotamos com os índices latinos. Para cada ponto no espaço-tempo descrito pelo elemento de linha (6.28),

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab}e^a_\mu e^b_\nu \tag{6.31}$$

onde $\eta_{ab} = diag(-1,1,1,1)$ é a métrica de Minkowiski. Isso nos diz que toda a informação acerca da geometria está contida nas tetradas. A relação acima expressa o tensor métrico do espaço curvo em termos da métrica local de Minkowiski do espaço tangente.

A equação de Dirac em um espaço-tempo curvo é dada por

$$[i\hbar\gamma^a e_a^\mu(\partial_\mu - \Gamma_\mu) + mc]\,\psi = 0\ , \tag{6.32}$$

onde

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{8}\omega_\mu{}^a{}_b[\gamma_a, \gamma^b] \tag{6.33}$$

é a conexão de spin na sua representação spinorial. O nome conexão de spin é devido ao fato de que ela pode ser usada para tomar a derivada covariante de spinores. Quando introduzimos a conexão de spin, a derivada covariante da tetrada deve ser escolhida como sendo nula, isto é,

$$\nabla_\mu e_\nu{}^a = \partial_\mu e_\nu{}^a - \Gamma^\lambda_{\mu\nu} e_\lambda{}^a + \omega_\mu{}^a{}_b e_\nu{}^b = 0\ , \tag{6.34}$$

onde $\Gamma^\lambda_{\mu\nu}$ é a conexão afim, definida como

$$\Gamma^\lambda_{\mu\nu} = \frac{1}{2}g^{\lambda\sigma}(\partial_\nu g_{\sigma\mu} + \partial_\mu g_{\sigma\nu} - \partial_\sigma g_{\mu\nu})\ . \tag{6.35}$$

Podemos então escrever os coeficientes da conexão de spin como

$$\omega_\mu{}^a{}_b = e_\nu{}^a e^\lambda{}_b \Gamma^\nu_{\mu\lambda} - e^\lambda{}_b \partial_\mu e_\lambda{}^a\ . \tag{6.36}$$

A partir das Eqs.(6.29) e (6.31) podemos obter a tetrada como sendo

$$e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u_x & 1 & 0 & 0 \\ -u_y & 0 & 1 & 0 \\ -u_z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.37}$$

A inversa da tetrada será dada por

$$e_a^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ u_x & 1 & 0 & 0 \\ u_y & 0 & 1 & 0 \\ u_z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.38}$$

Os coeficientes da conexão afim são obtidos das Eqs.(6.29) e (6.35) como sendo

$$\Gamma^0_{00} = \Gamma^0_{i0} = \Gamma_{ij} = \Gamma^i_{jk} = 0\ , \tag{6.39}$$

$$\Gamma^i_{00} = \frac{\epsilon_{ijk}\Omega_j u_k}{c} + \partial_0 u_i\ , \Gamma^i_{j0} = -\frac{\epsilon_{ijk}\Omega_k}{c} \tag{6.40}$$

onde os índices $i$,$j$,$k$ = 1,2,3. Com as tetradas e os coeficientes da conexão afim, podemos

escrever a conexão de spin como [87]

$$\Gamma_0 = \frac{i\vec{\Sigma}\cdot\vec{\Omega}}{2c}\ , \quad \Gamma_i = 0\ . \tag{6.41}$$

onde $\vec{\Sigma}$ é o operador de spin para um spinor de quatro componentes definido como

$$\vec{\Sigma} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \tag{6.42}$$

Dessa forma, o hamiltoniano relativístico de Dirac em um sistema de referência girante é escrito como

$$H = \beta mc^2 + c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} - \vec{\Omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{p} + \vec{\Sigma})\ . \tag{6.43}$$

Na mecânica clássica, as forças inerciais para um referencial girante são descritas adicionando o termo $\vec{\Omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$. Para o operador de Dirac obtido acima, temos um termo adicional $\vec{\Omega}\cdot\vec{\Sigma}$, que é chamado de acoplamento spin-rotação [88, 89].

## 6.5 Conclusões

Neste capítulo revisamos a função hamiltoniano de uma partícula clássica e os operadores correspondentes para o caso quântico e relativístico em um referencial girante. No caso clássico e quântico, a rotação adiciona ao hamiltoniano um acoplamento entre a rotação e o momento angular orbital. No caso relativístico, onde o spin das partículas aparece naturalmente, temos o acoplamento da rotação com o momento angular total, que é a soma do momento angular orbital com o de spin. Nos próximos capítulos vamos usar esse resultado para investigarmos os efeitos da rotação na estrutura eletrônica de alguns materiais.

# 7 Nanotubo de Carbono Girante

## 7.1 Introdução

Desde a sua descoberta, em 1991 por Iijima [23], os nanotubos de carbono têm atraído muita atenção devido às suas interessantes propriedades eletrônicas e de transporte. Tais materiais possuem muita flexibilidade, porém não se quebram facilmente sob a ação de deformações mecânicas. Na Fig.(20) temos uma ilustração de um nanotubo de carbono. Um nanotubo de carbono é uma rede hexagonal composta de carbono, isto é, uma folha de grafeno, enrolada formando um cilindro de diâmetro nanométrico e comprimento micrométrico.

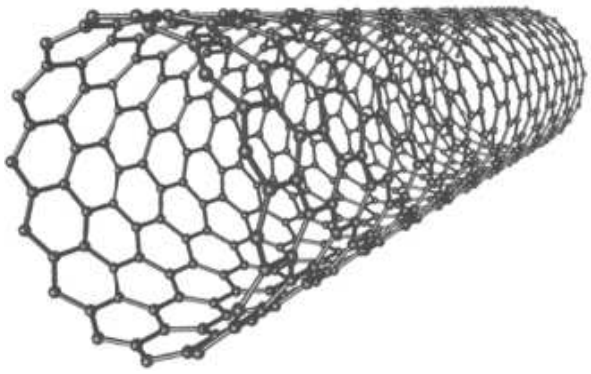

Figura 20: Nanotubo de carbono com borda zig-zag.

Em 2002, Král e Sadeghpour [31] mostraram que luz polarizada pode induzir uma rotação com frequências de GHz em nanotubos. Neste método, o momento angular de fótons infravermelhos são transferidos para os fônons do nanotubo induzindo uma rotação muito rápida. Possíveis aplicações deste método para girar microdispositivos também foram estudados neste trabalho. Outros trabalhos posteriores estudando a rotação em nanotubos de carbono foram feitos, dos quais podemos citar [90, 91]. Motivados por estes resultados, nós estudamos o efeito da rotação na estrutura eletrônica do nanotubo de carbono.

## 7.2 Espectro de energia para o nanotubo girante

Fazemos uso do modelo contínuo obtido nos capítulos anteriores para estados eletrônicos de baixa energia no grafeno. Um modelo contínuo simples para o nanotubo de carbono consiste em escrevermos o hamiltoniano de Dirac efetivo para o grafeno em coordenadas cilíndricas e impormos condições de contorno periódicas na direção circunferencial, lembrando que esse modelo só descreve nanotubos de carbono metálicos. Esse modelo foi usado em [30], onde o espectro de energia para o nanotubo de carbono foi obtido. Desta forma, o hamiltoniano efetivo é escrito como

$$H = -i\hbar v_F \sigma_x \partial_z - \frac{i\hbar v_F}{R}\sigma_y \partial_\phi \ . \tag{7.1}$$

Vamos considerar que o nanotubo gira em torno do eixo $z$, isto é, $\vec{\Omega} = \Omega\hat{z}$. Portando, considerando que temos o hamiltoniano de Dirac em duas dimensões, a rotação irá adicionar o termo

$$H_{rot} = -\Omega L_z - \Omega S_z \tag{7.2}$$

onde $S_z$ é o operador de spin real. A equação acima pode ser escrita como

$$H_{rot} = i\hbar\Omega\partial_\phi - \frac{\hbar}{2}\Omega s_z \tag{7.3}$$

onde $s_z$ é a matriz de Pauli atuando no spin real, em contraste com $\sigma_x$ e $\sigma_y$ na Eq.(7.1) que atuam no pseudospin relacionado com as duas sub-redes do grafeno. Como a matriz $s_z$ aparece apenas neste termo, podemos diagonalizar o hamiltoniano e escrever

$$H = -i\hbar v_F \sigma_x \partial_z - \frac{i\hbar v_F}{R}\sigma_y \partial_\phi + i\hbar\Omega\partial_\phi - \frac{\hbar\Omega s}{2} \tag{7.4}$$

onde $s = +1(-1)$ para spin real $up(down)$. Com $\psi = (\psi_A \quad \psi_B)^T$, temos duas equações acopladas dadas por

$$-i\hbar v_F\left(\partial_z - \frac{i\partial_\phi}{R}\right)\psi_B + i\hbar\partial_\phi\psi_A - \frac{\hbar\Omega s}{2}\psi_A = E\psi_A \tag{7.5}$$

e

$$-i\hbar v_F\left(\partial_z + \frac{i\partial_\phi}{R}\right)\psi_A + i\hbar\partial_\phi\psi_B - \frac{\hbar\Omega s}{2}\psi_B = E\psi_B \ . \tag{7.6}$$

Com o *ansatz*

$$\psi_A = e^{im\phi}u(z) \ , \quad \psi_B = e^{im\phi}v(z) \tag{7.7}$$

as equações acopladas serão escritas como

$$-i\hbar v_F\left(\partial_z+\frac{m}{R}\right)v=\left(E+\frac{\hbar\Omega s}{2}+\hbar\Omega m\right)u \tag{7.8}$$

e

$$-i\hbar v_F\left(\partial_z-\frac{m}{R}\right)u=\left(E+\frac{\hbar\Omega s}{2}+\hbar\Omega m\right)v\ , \tag{7.9}$$

onde $m=0,\pm1,\pm2,...$ . Desacoplando as equações acima, temos que

$$-\hbar^2v_F^2\left(\partial_z-\frac{m}{R}\right)\left(\partial_z+\frac{m}{R}\right)v=\left(E+\frac{\hbar\Omega s}{2}+\hbar\Omega m\right)^2v \tag{7.10}$$

e

$$-\hbar^2v_F^2\left(\partial_z+\frac{m}{R}\right)\left(\partial_z-\frac{m}{R}\right)u=\left(E+\frac{\hbar\Omega s}{2}+\hbar\Omega m\right)^2u \tag{7.11}$$

A solução para as equações acima é do tipo onda plana. Portanto, temos que

$$u(z)=e^{ikz},\ \ v(z)=e^{ikz} \tag{7.12}$$

O espectro de energia é dado por

$$E=\pm\hbar v_F\sqrt{k^2+\frac{m^2}{R^2}}-\hbar\Omega\left(m+\frac{s}{2}\right). \tag{7.13}$$

Quando $\Omega=0$, nós recuperamos o espectro para o nanotubo estático que foi obtido em [30]. A contribuição da rotação é um deslocamento no espectro de energia de $\hbar\Omega(m+\frac{s}{2})$. Temos também uma quebra na degenerescência de spin, semelhante ao que acontece no efeito Zeeman.

## 7.3 Conclusões

Neste capítulo nós usamos um modelo contínuo simples, onde escrevemos o hamiltoniano efetivo de Dirac para estados eletrônicos de baixa energia no grafeno em coordenadas cilíndricas e colocamos condições periódicas de contorno na direção $\phi$, para obtermos o espectro de energia para um nanotubo de carbono girante. Os níveis de energia variam linearmente com a rotação, fazendo com que a rotação induza um deslocamento na energia dos estados eletrônicos. O acoplamento spin-rotação funciona como a interação Zeeman, induzindo uma quebra na degenerescência de spin sem a presença de campo magnético.

# 8 *Fulereno girante na presença de campo magnético*

## 8.1 Introdução

Desde a sua descoberta em 1985 [16], o fulereno tem recebido grande atenção devido às suas propriedades e aplicações em diversas áreas. O fulereno $C_{60}$ não é o único fulereno que existe, mas é o que apresenta a maior simetria, é o mais estável e abundante, e é ele que iremos estudar. O $C_{60}$ tem um diâmetro de aproximadamente 1 nanômetro. É formado por 20 hexágonos e 12 pentágonos e em cada vértice tem um átomo de carbono (ver Figura 21). O fulereno tem potencial de aplicações na bioquímica e medicina como: atividade antiviral, atividade antioxidante e de armadilhas de radicais livres, transporte de drogas de efeito radioterápico e contrastes para diagnóstico por imagem, entre outras.

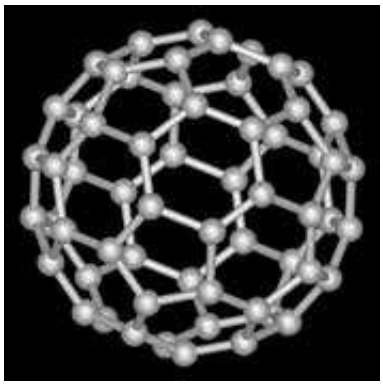

Figura 21: Fulereno $C_{60}$

Uma das características mais interessantes das moléculas $C_{60}$ é que elas giram [19, 20]. O fulereno sólido, ou fulerite $C_{60}$, é feito de moléculas girantes. Abaixo de $249K$ ele tem uma fase orientacionalmente ordenada reminiscente de um ferromagnético ou de um cristal líquido nemático. Entre $T_c = 250 - 260K$ ele apresenta uma transição de primeira ordem para uma fase orientacionalmente desordenada semelhante a um paramagnético ou um cristal líquido isotrópico. Na temperatura ambiente, a estrutura cúbica de face centrada

do fulerite tem, em cada célula unitária cúbica, quatro moléculas girando livremente com frequências em torno de [92] $10^{11}$ Hz. Essa rápida rotação tem importantes consequências nas propriedades nanotribológicas das superfícies cristalinas do fulerite [93], nas interações entre as moléculas de $C_{60}$ [94] e nas propriedades eletrônicas do cristal [95].

Embora a rotação seja muito importante para a determinação das propriedades físicas do $C_{60}$, poucos trabalhos [21, 96] foram publicados estudando sua influência nas propriedades eletrônicas da molécula. Existem várias teorias para se estudar as propriedades eletrônicas do fulereno, e podemos dividi-las em três grupos. O primeiro inclui métodos empíricos como gás de elétrons livres e cálculos tight-binding. O segundo é o método ab initio, com análise numérica. O terceiro grupo considera o modelo contínuo. Embora a descrição contínua seja limitada a elétrons próximo do nível de Fermi, ela apresenta atrativos muito interessantes. Primeiramente possibilita o estudo de grandes fulerenos, onde a análise numérica se torna difícil. Também revela a física de longas distâncias, o que é de grande importância para várias nanopartículas de carbono. E finalmente, o modelo contínuo elucida efeitos topológicos como fase Aharonov-Bohm e níveis de Landau anômalos devido às disclinações.

Nós investigamos a influência da rotação no espectro de energia do $C_{60}$ utilizando o modelo contínuo. Nós recuperamos o resultado obtido em [21], onde foi mostrado por métodos aproximativos que a rotação provoca um deslocamento na energia proporcional à velocidade de rotação da molécula, e também mostramos que a rotação introduz uma separação dos níveis de energia tipo Zeeman. Os modos zero preditos para o caso estático [18, 17, 97] não mais existem. No modelo contínuo a estrutura da rede desaparece e os pentágonos do $C_{60}$ são simulados por fluxos de calibre fictícios.

## 8.2 O Modelo Contínuo para o Fulereno Girante

O nosso ponto de partida é o fato de que, para estados eletrônicos próximos dos pontos de Dirac, o espectro de energia do grafeno pode ser obtido a partir de uma equação de Dirac efetiva de $(2+1)$ dimensões

$$-i\hbar v_F \sigma^\mu \partial_\mu \psi(r) = E\psi(r), \tag{8.1}$$

onde $\sigma^\mu$ são as matrizes de Pauli ($\mu = 1, 2$), $v_F$ é a velocidade de Fermi e $\psi = (\psi_A, \psi_B)^T$ é a função de onda que representa o *pseudospin*, que são as duas subredes $A$ e $B$.

Além do pseudospin, ainda temos outra entidade tipo-spin devido ao fato de termos dois vetores independentes, $\vec{K}_+ = \vec{K}$ e $\vec{K}_- = -\vec{K}$, que geram a mesma relação de dispersão linear (8.1). Esse grau de liberdade é chamado de $K$-spin. O produto tensorial entre os dois espaços de "spin" gera um espaço de dimensão quatro definido pela base $|\vec{K}_\pm A\rangle$ e $|\vec{K}_\pm B\rangle$. Portanto, cada função de onda $\psi_A$ e $\psi_B$ terá duas subcomponentes relacionadas com os dois pontos de Dirac: $\psi_A = (\psi_A^{K_+}, \psi_A^{K_-})^T$ e $\psi_B = (\psi_B^{K_+}, \psi_B^{K_-})^T$. As matrizes de Pauli que atuam na parte $K$ da função de onda serão denotadas por $\tau^\mu$. O $K$-spin desempenha um importante papel nos fluxos de calibre fictícios relacionados com a existência de pentágonos nas moléculas de $C_{60}$.

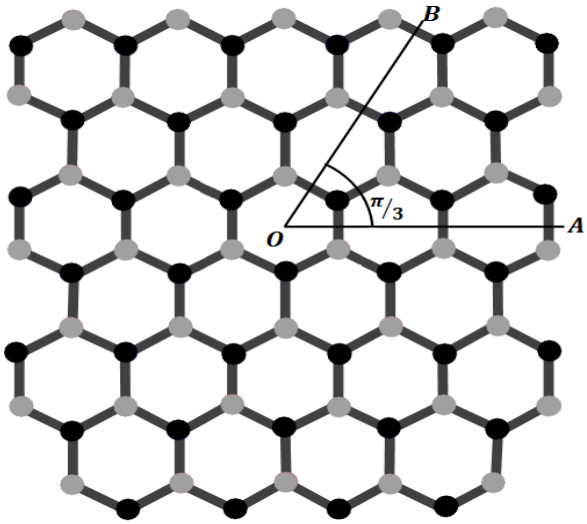


Figura 22: Corte de uma seção angular de $\pi/3$ de uma folha de grafeno. Conectando as ligações soltas dos dois lados OA e OB é obtido um cone com um pentágono no vértice. Os círculos cinza e preto representam as subredes A e B, respectivamente.

Para transformar uma folha de grafeno em uma molécula de $C_{60}$ é necessária a introdução de curvatura na sua estrutura hexagonal planar. Se nós cortarmos uma seção angular de $\pi/3$ do plano e juntarmos as ligações pendentes dos lados opostos [ver Figura(22)], um cone é criado com um pentágono no seu vértice. Os pentágonos são defeitos, chamados de desclinações. No limite contínuo, cada desclinação carrega uma singularidade de curvatura [98]

$$R_{12}{}^{12} = \lambda\delta(x)\delta(y), \tag{8.2}$$

onde $\lambda$ é o ângulo que caracteriza a seção angular removida, que no caso de um pentágono é $\pi/3$ e $\delta$ é a função delta de Dirac.

Para se obter o formato esférico, é necessário a introdução de 12 pentágonos simetricamente arranjados. O resultado é o $C_{60}$ que, no limite contínuo, tem 12 singularidades de curvatura que integradas dão a curvatura da esfera. Essas singularidades de curvatura

atuam como tubos de fluxo dando origem a uma fase tipo Aharonov-Bohm [99, 100]. Portanto, os fluxos geométricos levam em consideração a origem topológica dos defeitos e devem ser incluídos na equação de Dirac(8.1).

Desclinações são caracterizadas pelo vetor de Frank $\Theta_i$. Na teoria geométrica de defeitos [101] a curvatura associada à desclinação é a densidade areal dos vetores de Frank, tais que

$$\Omega^{ij} = \int\int dx^{\mu} \wedge dx^{\nu} R_{\mu\nu}{}^{ij}, \tag{8.3}$$

com

$$\Theta_i = \epsilon_{ijk}\Omega^{jk}. \tag{8.4}$$

O tensor de curvatura, em termos da conexão $\omega_{\nu j}{}^{i}$, é

$$R_{\mu\nu j}{}^{i} = \partial_{\mu}\omega_{\nu j}{}^{i} - \omega_{\mu j}{}^{k}\omega_{\nu k}{}^{i} - (\mu \leftrightarrow \nu). \tag{8.5}$$

Como nós temos um sistema bidimensional, as rotações são restritas ao subgrupo $SO(2)$, que é Abeliano. Isso implica que os termos quadrados em (8.5) vão a zero e o tensor de curvatura pode ser visto como o rotacional da conexão. Dessa forma, o vetor de Frank é dado por

$$\Omega^{ij} = \oint dx^{\mu}\omega_{\mu}{}^{ij}. \tag{8.6}$$

Usando (8.2), (8.3), (8.4) e $\lambda = \frac{\pi}{3}$ nós obtemos

$$\Theta^3 = \frac{\pi}{3}. \tag{8.7}$$

Equivalentemente, na teoria de calibre das desclinações [102] o vetor de Frank é obtido a partir de um fluxo de calibre Abeliano ou, pela integral do seu potencial vetor $W_{\mu}$,

$$\Theta^3 = \oint dx^{\mu} W_{\mu} = \frac{\pi}{3}, \tag{8.8}$$

análogo a (8.6), o que dá uma interpretação geométrica para o o campo de calibre $W_{\mu}$. O próximo passo é a inclusão do campo de calibre Abeliano $W_{\mu}$ na equação de Dirac via acoplamento mínimo.

Um segundo e terceiro campos de calibre são necessários para fixar o salto na função de onda de um cone quando é feito uma volta em torno do seu vértice. Como é possível ver na Fig.(22), a alternância entre as subredes cinza e preta do grafeno terão uma descontinuidade após a seção angular ser removida e as ligações soltas serem ligadas. Átomos cinza serão conectados com átomos cinza quando a junção for feita. A função de onda

adquire uma fase quando passa por uma junção de átomos da mesma subrede quando é dada uma volta em torno do vértice do cone. Para fazer essa descontinuidade desaparecer, essa fase deve ser removida. Isso é feito com a ajuda de campos de calibre não-Abelianos fictícios $\omega_\mu$ e $a_\mu$, que são estabelecidos de forma a compensar as fases na função de onda. Os fluxos produzidos por esses campos são

$$\oint dx^\mu \omega_\mu = -\frac{\pi}{6}\sigma^3 \tag{8.9}$$

e

$$\oint dx^\mu a_\mu = \frac{\pi}{2}\tau^2, \tag{8.10}$$

onde as integrais devem ser computadas ao longo de um caminho fechado ao redor do vértice $O$ na Fig.(22). Note que $\sigma^3$ é a matriz de Pauli usual atuando no pseudospin e $\tau^2$ é também a matriz de Pauli, mas desta vez atuando no $K$-spin.

O campo $\omega_\mu$ é puramente geométrico. De fato, ele é a conexão spinorial, que é parte da derivada covariante em coordenadas curvilíneas. Esse campo será naturalmente incluído na equação de Dirac de uma esfera e portanto não tem contribuição para o fluxo total. Cada uma das 12 desclinações do $C_{60}$ contribui com um fluxo de cada tipo, (8.8) e (8.10). Para considerarmos todos esses fluxos discretos na equação de Dirac substituímos todos eles por seus valores médios em toda a esfera. Isso é feito substituindo todos os fluxos pelo fluxo de um monopolo ('t Hooft-Polyakov) no centro da esfera [97, 17, 18]. A estrutura eletrônica do $C_{60}$ no regime de baixas energias deve ser obtida resolvendo a equação de Dirac na esfera incluindo o campo de um monopolo.

Para definirmos um spinor em um espaço curvo nós precisamos construir a base ortonormal $\{e_a = e^\mu{}_a e_\mu\}$, onde $e^\mu{}_a$ é a tetrada e satisfaz a seguinte relação

$$g_{\mu\nu} = e^a{}_\mu e^b{}_\nu \eta_{ab} \ . \tag{8.11}$$

$\{e_a\}$ é chamada de base não-coordenada. Nós vamos utilizar índices latinos $a, b, c, ...$ para denotar a base não-coordenada e índices gregos $\mu, \nu, \lambda, ...$ para a base coordenada.

Para termos uma ação invariante sobre uma transformação local de Lorentz, temos que substituir a derivada ordinária por uma derivada covariante, onde a derivada covariante é dada por [103]

$$\nabla_a \psi = e_a{}^\mu [\partial_\mu + \Omega_\mu]\psi \tag{8.12}$$

com

$$\Omega_\mu = \frac{1}{8}\omega^a{}_\mu{}^b [\gamma_a, \gamma_b] \ . \tag{8.13}$$

$\Omega_\mu$ é a conexão de spin na representação spinorial e surge quando usamos a base não-coordenada. O nome "conexão de spin"vem do fato de que ela pode ser usada para tomar derivada covariante de spinores, o que é impossível de se fazer utilizando coeficientes de conexão convencionais.

A derivada covariante da tetrada deve ser nula, isto é,

$$\nabla_\mu e_\nu{}^a = \partial_\mu e_\nu{}^a - \Gamma^\lambda_{\mu\nu} e_\lambda{}^a + \omega^a{}_\mu{}^b e_\nu{}^b = 0 \, . \tag{8.14}$$

Agora, é fácil ver que os coeficientes da conexão de spin são dados por

$$\omega^a{}_\mu{}^b = e_\nu{}^a e^\lambda{}_b \Gamma^\nu_{\mu\lambda} - e^\lambda{}_b \partial_\mu e_\lambda{}^a \, . \tag{8.15}$$

Na esfera $S^2$ nós temos que $g_{\mu\nu}$ =diag$(1, \sin^2\theta)$ e $e^\mu{}_b$ =diag$(1, \sin^{-1}\theta)$ e em duas dimensões as matrizes de Dirac se reduzem às matrizes de Pauli: $(\gamma^1, \gamma^2) \to (\sigma_x, \sigma_y)$. Portanto, nós podemos verificar que os coeficientes da conexão não nulos são

$$\omega^2{}_\varphi{}^1 = \cos\theta = -\omega^1{}_\varphi{}^2 \tag{8.16}$$

e então

$$\Omega_\varphi = -\frac{1}{2} i \cos\theta \sigma_z \, . \tag{8.17}$$

Desta forma, o operador de Dirac na esfera $S^2$ é dado por[104]

$$H = -\imath\hbar v_F \sigma_x \left( \partial_\theta + \frac{\cot\theta}{2} \right) - \frac{\imath\hbar v_F \sigma_y}{\sin\theta} \partial_\phi \, . \tag{8.18}$$

Como a carga elétrica, que é $\frac{1}{4\pi}$ vezes o fluxo do campo elétrico através de uma superfície fechada encobrindo-a, a carga do monopolo pode ser obtida das expressões (8.8) e (8.10), respectivamente:

$$g_W = \frac{1}{4\pi} \cdot 12 \cdot \frac{\pi}{3} = 1 \, , \tag{8.19}$$

para o campo $W_\mu$ e

$$g_a = \frac{1}{4\pi} \cdot 12 \cdot \frac{\pi}{2} = \frac{3}{2} \, , \tag{8.20}$$

para o campo $a_\mu$.

Em coordenadas esféricas o campo $W_\mu$ é dado por [97]

$$W_\theta = 0, W_\varphi = g_W \cos\theta \tag{8.21}$$

e o campo não-Abeliano $a_\mu$ por [97, 17, 18]

$$a_\theta = 0, a_\varphi = g_a \cos\theta \tau^2. \tag{8.22}$$

Portanto, a equação equivalente à Eq.(8.1) para o $C_{60}$ é [97]

$$\begin{aligned} -i\hbar v_F \Big[ \quad & \sigma_x \quad \left(\partial_\theta + \frac{\cot\theta}{2}\right) \\ + \quad & \frac{\sigma_y}{\sin\theta}\left(\partial_\varphi - i a_\varphi - i W_\varphi\right)\Big] \psi = E\psi. \end{aligned} \tag{8.23}$$

Considerando o eixo de rotação na direção $z$, a rotação no fulereno irá adicionar o termo

$$H_{rot} = -\Omega J_z \ , \tag{8.24}$$

onde

$$J_z = -i\hbar\partial_\varphi + S_z \tag{8.25}$$

é a componente $z$ do momento angular total. A expressão acima não é tão óbvia quanto se parece. O momento angular orbital é obtido do momento mecânico $\vec{\pi}$ como $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{\pi}$. Para uma partícula de carga $q$ se movendo na presença de um campo magnético ordinário, $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$, onde $\vec{A}$ é o potencial vetor associado ao campo magnético. Para uma partícula se movendo na presença de um campo magnético de um monopolo de carga $g$, o operador $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{\pi}$ não é o momento angular, pois ele não obedece as relações de comutação usuais para o momento angular, que devem ser respeitadas para garantir a sua conservação. Para resolver isso, é necessário adicionar um momento angular devido ao campo magnético do monopolo [105], $-g\hbar\hat{r}$. Da mesma forma, monopolos não abelianos contribuem para o momento mecânico via acoplamento mínimo pois carregam momento angular em seus campos [106]. Desta forma, nós temos [18, 97]

$$\begin{aligned} J_z = \quad & - \quad i\hbar\left(\partial_\varphi - \frac{1}{4}\left[\sigma_x, \sigma_y\right] cos\theta - i a_\varphi - i W_\varphi\right) \\ & + \quad \frac{\hbar}{2}\sigma_z \cos\theta + \hbar g_a \tau^2 \cos\theta + \hbar g_W \cos\theta + S_z \ . \end{aligned} \tag{8.26}$$

Levando em conta (8.21) e (8.22) e o fato de que $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$, podemos obter (8.25).

Considerando ainda um campo magnético na direção $\vec{B} = B_0\hat{z}$, a interação Zeeman será dada por

$$H_Z = \mathrm{g}\mu_B B_0 s_z \tag{8.27}$$

onde g é o fator g (para grafeno g = 2 [107]) e $\mu_B = e\hbar/2m$ é o magneton de Bohr.

## 8.3 Estrutura Eletrônica

O operador de Dirac para o fulereno girante na presença de um campo magnético uniforme na direção $z$ é dado por

$$H = -i\hbar v_F \sigma_x \left(\partial_\theta + \frac{\cot\theta}{2}\right) - \frac{i\hbar v_F \sigma_y}{\sin\theta}(\partial_\varphi \;\; - \;\; iA\cos\theta - iB\sin\theta) + \;\; i\hbar\Omega\partial_\varphi - \frac{s\hbar\Omega}{2} + \mathrm{g}\mu_B B_0 s \;, \quad (8.28)$$

onde $A = \pm(a_\varphi^k + W_\varphi)/\cos\theta = \pm 1/2, \pm 5/2$, $B = B_0/2$ e $s = +1(-1)$ para spin *up(down)*. Escrevendo

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \sum_\ell \frac{e^{\imath\ell\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} u_\ell(\theta) \\ v_\ell(\theta) \end{pmatrix}, \ell = 0, \pm 1, \pm 2, ... \quad (8.29)$$

nós teremos duas equações acopladas para $u_\ell$ e $v_\ell$ dadas por

$$-\imath\hbar v_F \left(\partial_\theta + \left[\frac{1}{2} - A\right]\cot\theta + \frac{\ell}{\sin\theta} - B\right) v_\ell = \left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2} - \mathrm{g}\mu_B B_0 s\right) u_\ell \quad (8.30)$$

e

$$-\imath\hbar v_F \left(\partial_\theta + \left[\frac{1}{2} + A\right]\cot\theta - \frac{\ell}{\sin\theta} + B\right) u_\ell = \left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2} - \mathrm{g}\mu_B B_0 s\right) v_\ell \;. \quad (8.31)$$

A equação desacoplada para $u_\ell$ com $x = \cos\theta$ é

$$\left[\partial_x(1-x^2)\partial_x \;\; - \;\; \frac{(\ell - Ax)^2 + \frac{1}{4} + A - \ell x}{1-x^2} + \frac{2B(\ell - Ax)}{\sqrt{1-x^2}} - B^2\right] u_\ell = \left[ \;\; - \;\; \frac{1}{v_F^2\hbar^2}\left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2} - \mathrm{g}\mu_B B_0 s\right)^2 + \frac{1}{4}\right] u_\ell \;. \quad (8.32)$$

Olhando para os limites assintóticos podemos escrever

$$u_\ell = (1-x)^\mu (1+x)^\nu \overline{u}_\ell(x) \;, \quad (8.33)$$

onde

$$\mu = \frac{1}{2}\left|\ell - A - \frac{1}{2}\right|, \nu = \frac{1}{2}\left|\ell + A + \frac{1}{2}\right| \;. \quad (8.34)$$

Substituindo (8.33) em (8.32), nós obtemos a seguinte equação para $\overline{u}_\ell(x)$

$$\begin{aligned}(1-x^2)\partial_x^2\overline{u}_\ell + [2(\nu-\mu) - 2(\mu+\nu+1)x]\partial_x\overline{u}_\ell \\ +\Bigg[-2\mu\nu - \mu - \nu - \frac{1}{2}(\ell^2 - A^2 + \frac{1}{4} - A) + \frac{2B(\ell - Ax)}{\sqrt{1-x^2}} \\ -B^2 + \frac{1}{v_F^2\hbar^2}\left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2} - \mathrm{g}\mu_B B_0 s\right)^2 - \frac{1}{4}\Bigg]\overline{u}_\ell = 0\ . \end{aligned} \tag{8.35}$$

Vamos analisar duas situações diferentes. Primeiramente vamos estudar o caso onde temos apenas rotação, e portanto, vamos fazer $B = 0$ na Eq.(8.35). Posteriormente vamos resolver o problema completo.

***Primeiro caso:*** $B = 0$.

Com $B = 0$, a Eq.(8.35) fica

$$\begin{aligned}(1-x^2)\partial_x^2\overline{u}_\ell + [2(\nu-\mu) - 2(\mu+\nu+1)x]\partial_x\overline{u}_\ell + (-2\mu\nu - \mu - \nu - \\ -\frac{1}{2}(\ell^2 - A^2 + \frac{1}{4} - A) + \frac{1}{v_F^2\hbar^2}\left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}\Bigg)\overline{u}_\ell = 0\ . \end{aligned} \tag{8.36}$$

É possível escrever a Eq.(8.36) na forma

$$z(1-z)\partial_x^2\overline{u}_\ell + [c - (a+b+1)z]\partial_x\overline{u}_\ell - ab\overline{u}_\ell = 0 \tag{8.37}$$

onde

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2} + \mu + \nu - \frac{1}{2}\left(4\mu^2(4+8\nu)\mu + 4\nu^2 + 4\nu + 1 + 4\alpha\right)^{\frac{1}{2}} \\ b &= \frac{1}{2} + \mu + \nu + \frac{1}{2}\left(4\mu^2(4+8\nu)\mu + 4\nu^2 + 4\nu + 1 + 4\alpha\right)^{\frac{1}{2}} \\ c &= 2\nu + 1 \\ z &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}x \end{aligned} \tag{8.38}$$

e nós definimos

$$\begin{aligned}\alpha &= -2\mu\nu - \mu - \nu - \frac{1}{2}(\ell^2 - A^2 + \frac{1}{4} - A) + \\ &\quad + \frac{1}{v_F^2\hbar^2}\left(E + \ell\hbar\Omega + \frac{s\hbar\Omega}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}\ . \end{aligned} \tag{8.39}$$

A solução da Eq.(8.37) é

$$\overline{u}_\ell = C_1\ {}_2F_1(a,b;c;z) + C_2 z^{1-c}\,{}_2F_1(a+1-c,b+1-c;2-c;z) \tag{8.40}$$

onde $C_1$ e $C_2$ são constantes de normalização e ${}_2F_1$ é uma função Hipergeométrica.

A nossa função de onda precisa ser de quadrado integrável. Portanto, a série hipergeométrica tem que ser convergente. Isso irá acontecer para valores arbitrários de $a$, $b$ e $c$ quando $-1 < z < 1$, e para $c > a + b$ quando $z = \pm 1$. Como $-1 \leq x \leq 1$, nós temos que $0 \leq z \leq 1$. Dessa forma, para termos convergência da série, a condição $c > a + b$ deve ser satisfeita.

Podemos ver que

$$a + b = 1 + 2\mu + 2\nu > c \tag{8.41}$$

pois $\mu$ é uma constante positiva. Assim, a condição de convergência não é satisfeita.

Este problema é resolvido quando definimos $a = -n$, onde $n$ é um inteiro. Essa escolha garante que temos uma solução polinomial de grau $n$. A partir dessa condição obtemos o espectro de energia para o fulereno girante, que é dado por

$$E^{(u)}_{n,\ell,s} = \hbar v_F \left[ \left( n + \mu + \nu + \frac{1}{2} \right)^2 - A - A^2 \right]^{1/2} - \left( \ell + \frac{s}{2} \right) \hbar\Omega \, . \tag{8.42}$$

Quando $\Omega = 0$ em (8.42), nós teremos o espectro de energia encontrado em [97] para o fulereno no modelo contínuo sem rotação.

A rotação adiciona dois termos no espectro de energia. O deslocamento na energia dado pelo termo $-\ell\hbar\Omega$ já havia sido calculado em [21], onde o espectro do fulereno girante foi obtido a partir da fase Aharonov-Carmi [83, 84]. O outro termo dependente da rotação surge naturalmente no modelo contínuo, pois ele vem do acoplamento spin-rotação.

Desacoplando as Eqs.(8.30) e (8.31) para $v_\ell$, analogamente como foi feito para $u_\ell$, nós podemos escrever

$$v_\ell = (1 - x)^\lambda (1 + x)^\rho \overline{v}_\ell(x) \, , \tag{8.43}$$

onde

$$\lambda = \frac{1}{2} \left| \ell - A + \frac{1}{2} \right| , \rho = \frac{1}{2} \left| \ell + A - \frac{1}{2} \right| \tag{8.44}$$

e obtemos outro espectro de energia dado por

$$E^{(v)}_{n,\ell,s} = \hbar v_F \left[ \left( n + \lambda + \rho + \frac{1}{2} \right)^2 - A - A^2 \right]^{1/2} - \left( \ell + \frac{s}{2} \right) \hbar\Omega. \tag{8.45}$$

Os espectros (8.42) e (8.45) têm que ser o mesmo, isto é, a condição $E^{(u)}_{n,\ell} = E^{(v)}_{n,\ell}$ deve ser satisfeita. Existem duas possibilidades para isso acontecer. A primeira é quando $\mu + \nu = \lambda + \rho$. Neste caso, os valores possíveis para $\ell$ são $|\ell| \geq ||A| + 1/2|$. O espectro de

energia se torna

$$E_{n,\ell,s} = \hbar v_F \left[\left(n + |\ell| + \frac{1}{2}\right)^2 - A - A^2\right]^{1/2} - \left(\ell + \frac{s}{2}\right)\hbar\Omega \tag{8.46}$$

e as auto funções são dadas por

$$\begin{aligned} u_\ell = (1-x)^\mu (1+x)^\nu [C_1 \ {}_2F_1(-n,b;c;z) \\ + C_2 z^{1-c} {}_2F_1(-n+1-c,b+1-c;2-c;z)] \end{aligned} \tag{8.47}$$

e

$$\begin{aligned} v_\ell = (1-x)^\lambda (1+x)^\rho [C_1 \ {}_2F_1(-n,b';c';z) \\ + C_2 z^{1-c'} {}_2F_1(-n+1-c',b'+1-c';2-c';z)], \end{aligned} \tag{8.48}$$

onde $c'$ e $b'$ tem a mesma forma de $c$ e $b$ mudando apenas $\mu$ por $\lambda$ e $\nu$ por $\rho$.

A segunda possibilidade é quando

$$E_{0,\ell,s} = -\left(\ell + \frac{s}{2}\right)\hbar\Omega, \tag{8.49}$$

o que faz com que o lado direito das Eqs.(8.30) e (8.31) vá pra zero. Neste caso, os valores possíveis para $\ell$ e $n$ são determinados por $|\ell| \leq ||A| - 1/2|$ e $n = 0$. Sem a rotação existem modos zero. A rotação remove os modos zero e separa os estados com spin opostos. As autofunções para este caso são dadas por

$$u_\ell = 0, \qquad v_\ell = C(1-x)^\lambda (1+x)^\rho. \tag{8.50}$$

Como $A = \frac{3}{2}k + 1 = -1/2, 5/2$ e nós temos que $|\ell| \leq ||A| - 1/2|$, então, quando $A = -1/2$, $\ell = 0$, e quando $A = 5/2$, $\ell = 0, \pm 1, \pm 2$. Portanto, a degenerescência dos estados dados por (8.49) seria 6, mas o acoplamento spin-rotação reduz para 3.

***Segundo caso:*** $B \neq 0$.

Considerando o caso completo, com $B \neq 0$, teremos que resolver a Equação (8.35). Usando o pacote algébrico computacional Maple, nós encontramos que a solução para a Eq.(8.35) é uma combinação linear de duas funções. Nós descartamos uma que é singular em $x = -1$(o polo sul) pois não é uma solução física, ficando apenas com

$$\overline{u}_\ell = C_1 \left(\frac{ix + \sqrt{1-x^2} - 1}{ix - \sqrt{1-x^2} + 1}\right)^c Hl\,(a,q,\alpha,\beta,\gamma,\delta,z)\,, \tag{8.51}$$

onde $c$ é uma constante que depende dos parâmetros da equação e $Hl$ é a função de Heun

local, que é uma das 192 soluções [108, 109] da equação de Heun geral

$$\left[z(z-1)(z-a)\frac{d^2}{dz^2}+(\gamma(z-1)(z-a)+\delta z(z-a)\right.$$
$$\left.+\epsilon z(z-1))\,\frac{d}{dz}+(\alpha\beta z-q)\right]Hl=0, \tag{8.52}$$

onde $\gamma+\delta+\epsilon=\alpha+\beta+1$.

Para satisfazer os requerimentos da mecânica quântica, a função de Heun deve ser definida em todo o fulereno e também ser de quadrado integrável. Uma possibilidade para fazer a função de Heun satisfazer esses requerimentos é o procedimento de aumento da convergência, que faz o uso da expansão da função de Heun em termos de funções hipergeométricas. Mas, esse procedimento tem uma restrição. É preciso que $a \notin [0,1]$. Em nosso caso $a = 1/2$, portanto não podemos usar esse procedimento.

Outra possibilidade é reduzir a função de Heun a um polinômio. Para isso uma condição necessária, mas não suficiente, é que $\alpha = -n$, onde $n$ é um inteiro positivo.

A partir dessa condição obtemos a seguinte relação

$$E^{(u)}_{n,\ell,s}=\hbar v_F\left[(n/2+\mu+\nu+1/2)^2-A-A^2+\right.$$
$$\left.+B^2-\frac{B^2A^2}{(\mu+\nu+1/2+n/2)^2}\right]^{1/2}-\left(\ell+\frac{s}{2}\right)\hbar\Omega+\mathrm{g}\mu_B B_0 s\,. \tag{8.53}$$

A condição adicional para termos um polinômio de Heun de grau $n$ é o parâmetro $q$ satisfazer uma equação polinomial de grau $n+1$. Portanto, para um dado $n$ nós teremos $n+1$ possíveis valores para $q$ e também diferentes relações para obter o valor de $q$. Assim, nós não temos uma condição matemática útil.

Contudo, nós temos uma condição física que no limite quando $\Omega \to 0$ e $B \to 0$ nós temos que recuperar o resultado obtido em [97]. Usando esse fato como uma condição de contorno, nós concluímos que devemos considerar apenas valores pares de $n$ na relação (8.53). Portanto, nós temos que

$$E^{(u)}_{n,\ell,s}=\hbar v_F\left[(n+\mu+\nu+1/2)^2-A-A^2+\right.$$
$$\left.+B^2-\frac{B^2A^2}{(\mu+\nu+1/2+n)^2}\right]^{1/2}-\left(\ell+\frac{s}{2}\right)\hbar\Omega+\mathrm{g}\mu_B B_0 s\,. \tag{8.54}$$

Da mesma forma que fizemos para $u_\ell$, nós podemos resolver para a função de onda

$v_\ell$. Isso nos dá o seguinte espectro de energia

$$E^{(v)}_{n,\ell,s} = \hbar v_F \Bigg[ (n+\lambda+\rho+1/2)^2 - A - A^2 + \\ + B^2 - \frac{B^2 A^2}{(\lambda+\rho+1/2+n)^2} \Bigg]^{1/2} - \left(\ell + \frac{s}{2}\right) \hbar\omega + \mathrm{g}\mu_B B_0 s \; . \tag{8.55}$$

As soluções para $u_\ell$ e $v_\ell$ devem ter o mesmo espectro, isto é, (8.54) deve ser igual a (8.55). Como no caso anterior, temos duas possibilidades para isso acontecer. A primeira é quando $\mu+\nu = \lambda+\rho$. Isso ocorre quando $|\ell| \geq ||A| + 1/2|$, e o espectro de energia fica

$$E_{n,\ell,s} = \hbar v_F \Bigg[ (n+|\ell|+1/2)^2 - A - A^2 + \\ + B^2 - \frac{B^2 A^2}{(|\ell|+1/2+n)^2} \Bigg]^{1/2} - \left(\ell + \frac{s}{2}\right) \hbar\Omega + \mathrm{g}\mu_B B_0 s \; , \tag{8.56}$$

e as autofunções são dadas por

$$u_\ell = C_1 (1-x)^\mu (1+x)^\nu \left( \frac{ix + \sqrt{1-x^2} - 1}{ix - \sqrt{1-x^2} + 1} \right)^c Hp_n, \tag{8.57}$$

$$v_\ell = C_2 (1-x)^\lambda (1+x)^\rho \left( \frac{ix + \sqrt{1-x^2} - 1}{ix - \sqrt{1-x^2} + 1} \right)^c Hp_n, \tag{8.58}$$

onde $Hp_n$ é o polinômio de Heun de grau $n$.

A segunda possibilidade é quando

$$E = -\left(\ell + \frac{s}{2}\right) \hbar\omega + \mathrm{g}\mu_B B_0 s, \tag{8.59}$$

fazendo o lado direito das Eqs.(8.30) e (8.31) ir para zero. Os valores possíveis para $\ell$ e $n$ são determinados por $|\ell| \leq ||A| - 1/2|$ e $n = 0$. Como já foi observado no caso anterior, para o fulereno estático e sem campo magnético existe um modo zero com degenerescência 6. A rotação desloca os modos zero de $-\ell\hbar\Omega$ enquanto que o acoplamento spin-rotação e a interação Zeeman separa esses estados em dois estados com spin opostos e com degenerescência 3. É possível cancelar a separação nos estados induzida pela rotação escolhendo $B_0 = \omega m/ge$.

## 8.4 Conclusões

Neste capítulo foi obtida a estrutura eletrônica do fulereno girante usando o modelo contínuo baseado em uma equação de Dirac efetiva. Foram estudados dois casos diferen-

tes. No primeiro temos apenas a rotação, no segundo consideramos também um campo magnético uniforme. O modelo contínuo inclui um campo de calibre não-Abeliano que simula a presença dos pentágonos na molécula de $C_{60}$. Para o primeiro caso, sem campo magnético, existem duas diferenças importantes entre o espectro de energia obtido aqui e o caso estático estudado em trabalhos anteriores. A primeira é um deslocamento dos níveis de energia devido ao acoplamento da rotação com o momento angular orbital, o que remove os modos zeros. A segunda diferença é uma quebra da degenerescência de spin devido ao acoplamento spin-rotação. No segundo caso, o campo magnético também adiciona um deslocamento nos níveis de energia e a interação Zeeman separa estados com spin real opostos. Escolhendo um valor específico para o campo magnético, é possível cancelar a quebra da degenerescência de spin devido a rotação.

# 9 Isolante Topológico Girante

## 9.1 Introdução

Existem muitos trabalhos na literatura que sugerem a existência de uma analogia entre rotação e campos eletromagnéticos, onde efeitos, que usualmente são induzidos por campo magnético, foram obtidos para partículas em um referencial girante. Em [110, 111], por exemplo, foi proposto um análogo gravitacional para o efeito Aharonov-Bohm, com um fluxo de rotação substituindo o fluxo magnético. Em [112] foi verificado que as forças inerciais induzem um fenômeno similar ao efeito Hall, e em [113] foi previsto uma diferença de potencial azimutal como consequência na lei de Ohm em um referencial girante, que é um análogo rotacional ao efeito Hall. Nos capítulos anteriores mostramos que o acoplamento spin-rotação em nanotubos de carbono e fulereno funciona como um termo Zeeman, quebrando a degenerescência de spin.

Em 2009, Dung-Hai Lee [47] estudou os efeitos de um campo magnético em um isolante topológico esférico, e mostrou que, para campo fortes, o efeito Hall quântico coexiste com o efeito spin Hall para os estados da superfície. Motivados por esse resultado e pela analogia existente entre campo magnético e rotação, neste capítulo vamos estudar um isolante magnético esférico girante.

## 9.2 Espectro de energia para um isolante topológico esférico girante

Para estudar o efeito da rotação nos estados da superfície de um isolante topológico esférico em três dimensões, precisamos escrever o operador efetivo para os estados da superfície (4.60) em uma superfície esférica. Isso foi feito por [114], onde o hamiltoniano efetivo foi obtido como sendo

$$H_{eff} = \frac{A}{R}\left[-i\sigma_y\left(\partial_\theta + \frac{\cot\theta}{2}\right) - \frac{i\sigma_x}{\sin\theta}\partial_\varphi\right] . \tag{9.1}$$

Esse hamiltoniano foi obtido a partir do hamiltoniano do *bulk* no limite contínuo [115, 78].

Considerando a equação de Dirac em duas dimensões, e com $\vec{\Omega} = \Omega\hat{z}$, a rotação adiciona

$$H_{rot} = i\Omega\partial_\varphi - \frac{\Omega\sigma_z}{2} \,, \tag{9.2}$$

onde agora, diferente dos sistemas anteriores, não temos mais os pseudospins e todas as matrizes de Pauli estão atuando no spin real das partículas. Dessa forma, o hamiltoniano efetivo na superfície de um isolante topológico girante é dado por

$$H = \frac{A}{R}\left[-i\sigma_y\left(\partial_\theta + \frac{\cot\theta}{2}\right) - \frac{i\sigma_x}{\sin\theta}\partial_\varphi\right] + i\Omega\partial_\varphi - \frac{\Omega\sigma_z}{2} \,. \tag{9.3}$$

Escrevendo

$$\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \sum_j \frac{e^{ij\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} u_j(\theta) \\ v_j(\theta) \end{pmatrix}, j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2... \tag{9.4}$$

nós teremos duas equações acopladas

$$\begin{aligned} -\frac{A}{R}\left(\partial_\theta + \frac{1}{2}\cot\theta - \frac{j}{\sin\theta}\right) v_j &= \\ &= \left(E + j\Omega + \frac{\Omega}{2}\right) u_j \,; \\ \frac{A}{R}\left(\partial_\theta + \frac{1}{2}\cot\theta + \frac{j}{\sin\theta}\right) u_j &= \\ &= \left(E + j\Omega - \frac{\Omega}{2}\right) v_j \,. \end{aligned} \tag{9.5}$$

Desacoplando essas equações para $u_j$ e fazendo a substituição $x = \cos\theta$, nós teremos

$$\begin{aligned} \left[\partial_x(1 - x^2)\partial_x - \frac{j^2 + \frac{1}{4} + jx}{1 - x^2}\right] u_j \\ = -\frac{R^2}{A^2}\left[(E + j\Omega)^2 - \frac{1}{4}\left(\Omega^2 + \frac{A^2}{R^2}\right)\right] u_j \,. \end{aligned} \tag{9.6}$$

Olhando para os limites assintóticos, podemos usar o *ansatz*

$$u_j = (1 + x)^\mu (1 - x)^\nu \overline{u}_j(x) \,, \tag{9.7}$$

onde

$$\mu = \frac{1}{2}\left|j - \frac{1}{2}\right|, \nu = \frac{1}{2}\left|j + \frac{1}{2}\right| \,. \tag{9.8}$$

Substituindo a equação (9.7) em (9.6), nós obtemos a seguinte equação para $\overline{u}_j(x)$

$$\begin{aligned}(1-x^2)\partial_x^2\overline{u}_j + [2(\mu-\nu)-2(\mu+\nu+1)x]\partial_x\overline{u}_j \\ + \left(-2\mu\nu-\mu-\nu-\frac{1}{2}(j^2+\frac{1}{4})+\right. \\ \left.+\frac{R^2}{A^2}\left[(E+j\Omega)^2-\frac{1}{4}\left(\Omega^2+\frac{A^2}{R^2}\right)\right]\right)\overline{u}_j = 0\ .\end{aligned} \tag{9.9}$$

A solução da Eq.(9.9) é

$$\begin{aligned}\overline{u}_j &= C_1\ {}_2F_1(a,b;c;z) + \\ &+ C_2 z^{1-c}\,{}_2F_1(a+1-c,b+1-c;2-c;z)\ ,\end{aligned} \tag{9.10}$$

onde $C_1$ e $C_2$ são constantes de normalização, ${}_2F_1$ é a função Hipergeométrica e

$$\begin{aligned}a &= \frac{1}{2}+\mu+\nu-\frac{1}{2}\left(4\mu^2+4\nu^2+\frac{1}{2}-2j^2+4\alpha\right)^{\frac{1}{2}} \\ b &= \frac{1}{2}+\mu+\nu+\frac{1}{2}\left(4\mu^2+4\nu^2+\frac{1}{2}-2j^2+4\alpha\right)^{\frac{1}{2}} \\ c &= 2\mu+1 \\ z &= \frac{1}{2}+\frac{1}{2}x\end{aligned} \tag{9.11}$$

e nós definimos

$$\alpha = \frac{R^2}{A^2}\left[(E+j\Omega)^2-\frac{1}{4}\left(\Omega^2+\frac{A^2}{R^2}\right)\right]\ . \tag{9.12}$$

Assim como no caso do fulereno girante, a série hipergeométrica será divergente a menos que $a=-n$, onde $n$ é um inteiro positivo. Isso garante que temos uma solução polinomial de grau $n$. Dessa condição, obtemos o espectro de energia dado por

$$E^{(u)}_{n,j} = \pm\frac{A}{R}\left[\left(n+\mu+\nu+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{\Omega^2R^2}{4A^2}\right]^{1/2}-j\Omega\ . \tag{9.13}$$

É fácil ver que $\mu+\nu=|j|$. Portanto

$$E^{(u)}_{n,j} = \pm\frac{A}{R}\left[\left(n+|j|+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{\Omega^2R^2}{4A^2}\right]^{1/2}-j\Omega\ . \tag{9.14}$$

Desacoplando Eqs.(9.5) para $v_j$, da mesma forma como foi feito para $u_j$, nós podemos escrever

$$v_j = (1+x)^\gamma(1-x)^\delta\overline{u}_j(x)\ , \tag{9.15}$$

onde

$$\gamma = \frac{1}{2}\left|j+\frac{1}{2}\right|, \delta = \frac{1}{2}\left|j-\frac{1}{2}\right| \tag{9.16}$$

e

$$\begin{aligned} \overline{v}_j &= C_3\ {}_2F_1(a',b';c';z) + \\ &+ C_4 z^{1-c'}\,{}_2F_1(a'+1-c',b'+1-c';2-c';z) \end{aligned} \tag{9.17}$$

onde $a'$, $b'$ e $c'$ é igual a $a$, $b$ e $c$, respectivamente, apenas trocando $\mu$ por $\gamma$ e $\nu$ por $\delta$.

O espectro de energia é dado por

$$E^{(v)}_{n,j} = \pm\frac{A}{R}\left[\left(n+|j|+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{\Omega^2R^2}{4A^2}\right]^{1/2} - j\Omega\ , \tag{9.18}$$

que é o mesmo espectro (9.14) obtido para $u_j$. A rotação adiciona dois termos no espectro de energia, induzindo um deslocamento nos níveis de energia.

Colocando $\Omega = 0$, nós recuperamos o espectro de energia para o isolante topológico esférico estático obtido em [114], onde se observou que pelo fato de estarmos em uma esfera, os estados com energia igual a zero são excluídos, existindo um gap de energia de $2A/R$ entre os estados com energia positiva e negativa. Na Fig. 23 nós esboçamos o espectro de energia (9.18) em função de $j$ para o caso onde temos uma rotação constante igual a zero e diferente de zero. A rotação aumenta consideravelmente o gap de energia.

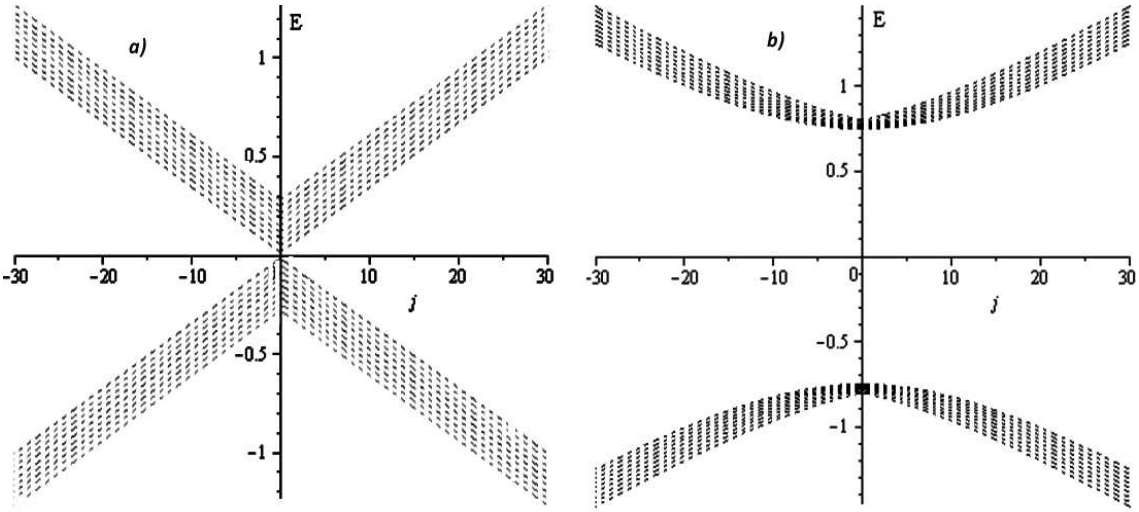


Figura 23: Gráfico do espectro de energia (9.18) em função do número quântico azimutal $j$. Em $a$) temos a rotação igual a zero e em $b$) temos uma rotação constante diferente de zero. Para os dois casos temos $n$ variando de 0 à 8.

Na Fig. 24 nós esboçamos o espectro (9.18) em função da rotação.

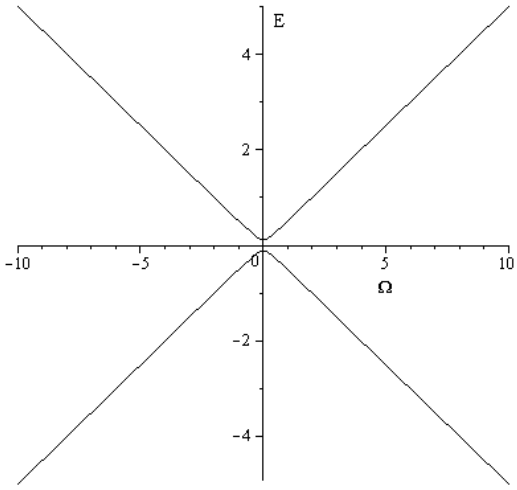


Figura 24: Gráfico do espectro de energia (9.18) em função da rotação $\Omega$. Aqui, escolhemos $n = 2$ e $j = 1/2$.

## 9.3 Conclusões

Neste capítulo, motivados por resultados anteriores, nós consideramos um isolante topológico esférico girante. Nós encontramos o espectro de energia para os estados da superfície utilizando o hamiltoniano efetivo de Dirac. A rotação acrescenta dois termos, deslocando os níveis de energia. O isolante topológico esférico apresenta um gap de energia nos estados de superfície, como foi verificado em trabalhos anteriores, e a rotação contribui fortemente para o aumento desse gap de energia. O espectro de energia que foi obtido aqui difere do espectro obtido para um isolante topológico esférico na presença de um campo magnético uniforme que foi obtido anteriormente, não ficando claro se teremos efeito Hall quântico e/ou o efeito Hall quântico de spin devido a rotação como acontece no caso onde temos apenas campo magnético. Isso ainda precisa ser verificado.

# *Conclusões e Perspectivas*

Nesta Tese estudamos as propriedades eletrônicas de diversos sistemas físicos da matéria condensada utilizando dois modelos contínuos distintos, o modelo de massa efetiva e um hamiltoniano de Dirac efetivo. O modelo de massa efetiva é bastante útil para a descrição de portadores de carga em metais e semicondutores. Já o hamiltoniano efetivo de Dirac descreve os estados eletrônicos de baixa energia em materiais baseados em carbono como, grafeno, fulereno e nanotubos de carbono, e também descreve estados da periferia em isolantes topológicos.

Dentro da teoria de massa efetiva, é natural o aparecimento de sistemas com massa efetiva variável, mas ainda não existe uma definição de qual seja o operador de energia cinética mais adequado para descrever esses sistemas. Propomos um novo hamiltoniano cinético com massa dependendo da posição e mostramos que ele satisfaz os requisitos fundamentais da mecânica quântico como, ser hermitiano, satisfazer a invariância galileana e obedecer à equação da continuidade. Em nosso modelo consideramos todas as permutações possíveis entre os operadores, de forma a recuperar a hamiltoniana clássica quando a massa for constante. Utilizamos o nosso modelo para obter a estrutura de minibandas de uma heteroestrutura formada por dois metais diferentes, verificando que o nosso modelo não apresenta inconsistências quando a massa varia abruptamente, e comparamos com o resultado obtido com um modelo anteriormente proposto. A diferença entre os resultados foi quantitativa e não qualitativa. Apenas um experimento poderá dizer qual modelo apresenta o resultado mais próximo da realidade.

Ainda na teoria de massa efetiva, obtemos a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma superfície curva com a massa efetiva dependendo da posição. Partimos do nosso hamiltoniano com massa variável e seguimos a abordagem de da Costa, onde surge um potencial geométrico devido à curvatura. Mostramos que o potencial geométrico não é alterado pelo fato de termos a massa dependendo da posição. Essa equação pode ser usada para descrever os mais diversos sistemas físicos bidimensionais onde temos uma massa efetiva variável. Como uma primeira aplicação, estudamos uma junção de dois cilindros de raios diferentes, onde a massa efetiva depende do raio do cilindro. Na região da junção, o raio e a massa efetiva variam continuamente. É possível fazer uma separação

de variáveis, e mostramos que a equação diferencial na direção do eixo de simetria do cilindro ganha dois termos adicionais, sugerindo que o transporte eletrônico na junção será afetado pelo fato da massa não ser constante. Esse problema já havia sido resolvido por outros autores que obtiveram o coeficiente de transmissão para diferentes valores dos raios, no entanto, eles consideraram a massa como sendo constante. Nós fazemos uma descrição mais completa ao levar em conta a variação na massa.

Os modelos que foram propostos aqui contribuem de forma direta para uma melhor descrição teórica de sistemas com massa efetiva dependendo da posição. Ainda não existe uma posição definida acerca de qual seja o hamiltoniano cinético adequado para descrever esses sistemas, e nós propomos um modelo que pode ser a solução para esse problema ainda em aberto na física. Para os sistemas bidimensionais curvos, que apresentam diversas propriedades interessantes e uma variedade de possíveis aplicações, nosso trabalho possibilita uma descrição mais completa, onde é possível levar em conta a variação na massa efetiva.

Utilizando o hamiltoniano efetivo de Dirac, estudamos o grafeno, nanotubos de carbono, fulereno e isolantes topológicos. Para o grafeno consideramos um substrato formado por uma heteroestrutura de dois materiais diferentes, onde cada material induz um gap na estrutura eletrônica e uma velocidade de Fermi específica. Desta foram, os estados eletrônicos de baixa energia são descritos por uma equação de Dirac efetiva com termo de gap (massa) e velocidade de Fermi dependentes da posição. Nós escrevemos o hamiltoniano de Dirac levando em conta que ele deve ser hermitiano. Encontramos uma relação que dá a estrutura de minibandas para um caso geral e esboçamos o gráfico do primeiro minigap para um substrato formado por $h$-BN e SiC com diferentes tamanhos para cada material. As heteroestruturas são de grande utilidade na eletrônica pela fato delas restringirem o movimento dos portadores de carga criando um confinamento quântico. Com o método que nós propomos, é possível a criação de poços quânticos, anéis quânticos e outros sistemas envolvendo heteroestruturas no grafeno, apenas alterando o seu substrato.

Motivados por resultados experimentais, nós estudamos os efeitos da rotação no espectro de energia do nanotubo de carbono. O modelo contínuo que usamos para os estados de baixa energia nos nanotubos consiste em escrever o hamiltoniano de Dirac efetivo para o grafeno em coordenadas cilíndricas e impor condições periódicas de contorno na direção $\phi$. A rotação é incorporada em um acoplamento com o momento angular total. O acoplamento da rotação com o momento angular orbital adiciona um deslocamento nos níveis de energia, enquanto que o acoplamento da rotação com o momento angular de spin, que é

chamado de acoplamento spin-rotação, funciona como um termo Zeeman separando estados com spin opostos, quebrando assim a degenerescência de spin. A rápida rotação dos nanotubos de carbono é uma realidade experimental e portanto nós esperamos que esse resultado contribua para um melhor entendimento desse sistema. Um sistema girante é acelerado, portanto, é não-inercial. O princípio de equivalência da relatividade geral não distingue sistemas não-inerciais de sistemas na presença de campos gravitacionais. Portanto, o que nós obtemos é um efeito gravitacional na mecânica quântica, que deve ser observado com técnicas experimentais. Um próximo trabalho seria considerar uma rotação acelerada e também a presença de um campo magnético.

Para o fulereno estudamos os efeitos da rotação na estrutura eletrônica e também acrescentamos um campo magnético uniforme na direção do eixo de rotação. O modelo contínuo para o fulereno inclui campos de calibre não-abelianos que simulam os pentágonos na molécula de $C_{60}$. Assim como no caso do nanotubo de carbono, a rotação será incluída no acoplamento com o momento angular total. O campo magnético entra na equação via acoplamento mínimo e também consideramos a interação Zeeman, que é o acolamento do campo magnético com o spin real dos portadores de carga. A rotação desloca os níveis de energia, fazendo com que não existam mais modos zero, como acontece no caso estático. Também temos uma quebra de degenerescência de spin devido ao acoplamento spin-rotação. Isso sugere a possibilidade de se observar ressonância do spin do elétron sem um campo magnético, apenas controlando a velocidade de rotação com uma variação da temperatura. O campo magnético também contribui com um deslocamento nos níveis de energia e o termo Zeeman separa os estados com spin opostos. Escolhendo um valor específico para o campo magnético, é possível cancelar a quebra de degenerescência de spin devido a rotação. O fulereno $C_{60}$ gira naturalmente na temperatura ambiente. Portanto, os resultados obtidos aqui contribuem de forma direta no entendimento dessas moléculas. Como foi comentado anteriormente, esse resultado pode ser considerado como um efeito gravitacional na mecânica quântica. Como a velocidade de rotação do $C_{60}$ varia com a temperatura, um problema bastante interessante seria considerar a rotação variando com o tempo e analisar os efeitos dessa mudança nas propriedades eletrônicas. Nós esperamos investigar esse problema em trabalhos posteriores.

Por último, estudamos os efeitos da rotação em um isolante topológico esférico. Os efeitos de um campo magnético para esse sistema já foram estudados anteriormente e, devido a uma analogia existente entre rotação e campos eletromagnéticos, buscamos comparar com os efeitos da rotação. Obtemos o espectro de energia, notando que a rotação adiciona dois termos que induzem um deslocamento nos níveis de energia. Diferente do

que acontece nos materiais à base de carbono, o acoplamento spin-rotação no isolante topológico não quebra a degenerescência de spin. O próximo passo é verificar a existência do efeito Hall quântico e do efeito spin Hall devido à rotação, como acontece no caso onde temos apenas um campo magnético uniforme.

O grafeno, nanotubos de carbono, fulereno e isolantes topológicos estão entre os materiais que são considerados a base da nova geração de dispositivos eletrônicos e apresentam uma infinidade de aplicações em diferentes áreas. Portanto, os resultados apresentados aqui contribuem de forma direta para o desenvolvimento do conhecimento e da tecnologia.

# *Referências Bibliográficas*


[1] WANNIER, G. H. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals. *Phys. Rev.*, v. 52, p. 191–197, Aug 1937.

[2] SLATER, J. C. Electrons in perturbed periodic lattices. *Phys. Rev.*, v. 76, p. 1592–1601, Dec 1949.

[3] JAMES, H. M. Electronic states in perturbed periodic systems. *Phys. Rev.*, v. 76, p. 1611–1624, Dec 1949.

[4] KITTEL, C.; MITCHELL, A. H. Theory of donor and acceptor states in silicon and germanium. *Phys. Rev.*, v. 96, p. 1488–1493, Dec 1954.

[5] LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Phys. Rev.*, v. 97, p. 869–883, Feb 1955.

[6] KOHN, W.; LUTTINGER, J. M. Theory of donor states in silicon. *Phys. Rev.*, v. 98, p. 915–922, May 1955.

[7] STERN, F.; DAS SARMA, S. Electron energy levels in GaAs-G$a_{1-x}$A$l_x$As heterojunctions. *Phys. Rev. B*, v. 30, p. 840–848, Jul 1984.

[8] LASSNIG, R. k-p theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, v. 31, p. 8076–8086, Jun 1985.

[9] BASTARD, G.; MENDEZ, E. E.; CHANG, L. L.; ESAKI, L. Variational calculations on a quantum well in an electric field. *Phys. Rev. B*, v. 28, p. 3241–3245, Sep 1983.

[10] YOKOYAMA, K.; HESS, K. Monte carlo study of electronic transport in A$l_{1-x}$G$a_x$As/GaAs single-well heterostructures. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 5595–5606, Apr 1986.

[11] BASTARD, G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, v. 24, p. 5693–5697, Nov 1981.

[12] KAHEN, K. B.; LEBURTON, J. P. Optical constants of GaAs-A$l_x$G$a_{1-x}$As superlattices and multiple quantum wells. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 5465–5472, Apr 1986.

[13] BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. Space-charge effects on electron tunneling. *Phys. Rev.*, v. 152, p. 683–692, Dec 1966.

[14] CASTRO NETO, A. H.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, v. 81, p. 109–162, Jan 2009.

[15] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, v. 71, p. 622–634, May 1947.

[16] KROTO, H.; HEATH, J.; OBRIEN, S.; CURL, R.; SMALLEY, R. C-60 - buckminsterfullerene. *NATURE*, v. 318, n. 6042, p. 162–163, 1985.

[17] GONZALEZ, J.; GUINEA, F.; VOZMEDIANO, M. A. H. Continuum approximation to fullerene molecules. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, p. 172–175, Jul 1992.

[18] GONZALEZ, J.; GUINEA, F.; VOZMEDIANO, M. The electronic spectrum of fullerenes from the dirac equation. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 406, n. 3, p. 771 – 794, 1993.

[19] YANNONI, C. S.; JOHNSON, R. D.; MEIJER, G.; BETHUNE, D. S.; SALEM, J. R. Carbon-13 nmr study of the c60 cluster in the solid state: molecular motion and carbon chemical shift anisotropy. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 95, n. 1, p. 9–10, 1991.

[20] NEUMANN *ET AL.*, D. A. Coherent quasielastic neutron scattering study of the rotational dynamics of c60 in the orientationally disordered phase. *Phys. Rev. Lett.*, v. 67, p. 3808–3811, Dec 1991.

[21] SHEN, J. Q.; HE, S.; ZHUANG, F. Aharonov-carmi effect and energy shift of valence electrons in rotating c60 molecules. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, v. 33, p. 35–38, 2005.

[22] SHEN, J.-Q.; HE, S.-L. Geometric phases of electrons due to spin-rotation coupling in rotating $c_{60}$ molecules. *Phys. Rev. B*, v. 68, p. 195421, Nov 2003.

[23] IIJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, London, v. 354, p. 56, Nov 1991.

[24] MINTMIRE, J. W.; DUNLAP, B. I.; WHITE, C. T. Are fullerene tubules metallic? *Phys. Rev. Lett.*, v. 68, p. 631–634, Feb 1992.

[25] SAITO, R.; FUJITA, M.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. Electronic structure of graphene tubules based on c60. *Phys. Rev. B*, v. 46, p. 1804–1811, Jul 1992.

[26] HAMADA, N.; SAWADA, S.-I.; OSHIYAMA, A. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.*, v. 68, p. 1579–1581, Mar 1992.

[27] BETHUNE, D. S.; KLANG, C. H.; DE VRIES, M. S.; GORMAN, G.; SAVOY, R.; VAZQUEZ, J.; BEYERS, R. Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls. *Nature*, London, v. 363, p. 605, Jun 1993.

[28] IIJIMA, S.; ICHIHASHI, T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, London, v. 363, p. 603, Jun 1993.

[29] KANE, C. L.; MELE, E. J. Size, shape, and low energy electronic structure of carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, v. 78, p. 1932–1935, Mar 1997.

[30] GONZÁLEZ, J.; GUINEA, F.; HERRERO, J. Propagating, evanescent, and localized states in carbon nanotube–graphene junctions. *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 165434, Apr 2009.

[31] KRÁL, P.; SADEGHPOUR, H. R. Laser spinning of nanotubes: A path to fast-rotating microdevices. *Phys. Rev. B*, v. 65, p. 161401, Mar 2002.

[32] NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, Washington, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.

[33] GIOVANNETTI, G.; KHOMYAKOV, P. A.; BROCKS, G.; KELLY, P. J.; VAN DEN BRINK, J. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 073103, Aug 2007.

[34] ZHOU, S. Y.; GWEON, G.-H.; FEDOROV, A. V.; FIRST, P. N.; DE HEER, W. A.; LEE, D.-H.; GUINEA, F.; CASTRO NETO, A. H.; LANZARA, A. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nat Mater*, v. 6, p. 770, Oct 2007.

[35] HWANG, C.; SIEGEL, D. A.; MO, S.-K.; REGAN, W.; ISMACH, A.; ZHANG, Y.; ZETTL, A.; LANZARA, A. Fermi velocity engineering in graphene by substrate modification. *Sci. Rep.*, v. 2, p. 590, Aug 2012.

[36] KLITZING, K. V.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 494–497, Aug 1980.

[37] THOULESS, D. J.; KOHMOTO, M.; NIGHTINGALE, M. P.; DEN NIJS, M. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, p. 405–408, Aug 1982.

[38] KONIG, M.; WIEDMANN, S.; BRüNE, C.; ROTH, A.; BUHMANN, H.; MOLENKAMP, L. W.; QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, Washington, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007.

[39] FU, L.; KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, p. 106803, Mar 2007.

[40] MOORE, J. E.; BALENTS, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 121306, Mar 2007.

[41] ROY, R. Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 195322, May 2009.

[42] HSIEH, D.; QIAN, D.; WRAY, L.; XIA, Y.; HOR, Y. S.; CAVA, R. J.; HASAN, M. Z. A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, London, v. 452, p. 970, 2008.

[43] MOORE, J. E.; BALENTS, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 121306, Mar 2007.

[44] KANE, C. L.; MELE, E. J. Z2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 146802, Sep 2005.

[45]

[46] WANG, Z.; QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Equivalent topological invariants of topological insulators. *New Journal of Physics*, v. 12, n. 6, p. 065007, 2010.

[47] LEE, D.-H. Surface states of topological insulators: The dirac fermion in curved two-dimensional spaces. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 196804, Nov 2009.

[48] KITTEL, C. *Introdution to solid state physics*. 8th. ed. Berkeley: John Wiley and Sons, Inc, 2005.

[49] ASHCROFT, N.; MERMIN, N. *Solid state physics*. 1st. ed. Orlando: Harcourt, 1976.

[50] GORA, T.; WILLIAMS, F. Theory of electronic states and transport in graded mixed semiconductors. *Phys. Rev.*, v. 177, p. 1179–1182, Jan 1969.

[51] ZHU, Q.-G.; KROEMER, H. Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors. *Phys. Rev. B*, v. 27, p. 3519–3527, Mar 1983.

[52] CAVALCANTE, F. S. A.; COSTA FILHO, R. N.; FILHO, J. R.; DE ALMEIDA, C. A. S.; FREIRE, V. N. Form of the quantum kinetic-energy operator with spatially varying effective mass. *Phys. Rev. B*, v. 55, p. 1326–1328, Jan 1997.

[53] VON ROOS, O. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. *Physical Review B*, v. 27, n. 12, p. 7547–7552, 1983.

[54] MORROW, R. A.; BROWNSTEIN, K. R. Model effective-mass hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions. *Phys. Rev. B*, v. 30, p. 678–680, Jul 1984.

[55] MUSTAFA, O.; MAZHARIMOUSAVI, S. H. A quasi-free position-dependent mass jump and self-scattering correspondence. *Physica Scripta*, Stockholm, v. 82, n. 6, p. 065013, DEC 2010.

[56] DE SOUZA DUTRA, A.; ALMEIDA, C. Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 275, n. 1–2, p. 25 – 30, 2000.

[57] LI, T. L.; KUHN, K. J. Band-offset ratio dependence on the effective-mass hamiltonian based on a modified profile of the GaAs-A$l_x$G$a_{1-x}$As quantum well. *Phys. Rev. B*, v. 47, p. 12760–12770, May 1993.

[58] LIMA, J. R. F.; VIEIRA, M.; FURTADO, C.; MORAES, F.; FILGUEIRAS, C. Yet another position-dependent mass quantum model. *Journal of Mathematical Physics*, Woodbury, v. 53, n. 7, p. 072101, 2012.

[59] LEVYLEBLOND, J. Position-dependent effevtive-mass and galilean invariance. *Physical Review A*, Woodbury, v. 52, n. 3, p. 1845–1849, SEP 1995.

[60] LEVY-LEBLOND, J. M. Elementary quantum models with position-dependent mass. *European Journal of Physics*, Bristol, v. 13, n. 5, p. 215, 1992.

[61] EINEVOLL, G. T. Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. ii. strained systems. *Phys. Rev. B*, v. 42, p. 3497–3502, Aug 1990.

[62] MENDACH, S.; SCHUMACHER, O.; HEYN, C.; SCHNüLL, S.; WELSCH, H.; HANSEN, W. Preparation of curved two-dimensional electron systems in InGaAs/GaAs-microtubes. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 23, n. 3–4, p. 274 – 279, 2004.

[63] JOGLEKAR, Y. N.; SAXENA, A. Curvature-induced p-n junctions in bent or folded bilayer graphene sheets. *Phys. Rev. B*, v. 80, p. 153405, Oct 2009.

[64] DANDOLOFF, R.; SAXENA, A.; JENSEN, B. Geometry-induced potential on a two-dimensional section of a wormhole: Catenoid. *Phys. Rev. A*, v. 81, p. 014102, Jan 2010.

[65] ATANASOV, V.; SAXENA, A. Tuning the electronic properties of corrugated graphene: Confinement, curvature, and band-gap opening. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 205409, May 2010.

[66] DA COSTA, R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. *Phys. Rev. A*, v. 23, p. 1982–1987, Apr 1981.

[67] MARCHI, A.; REGGIANI, S.; RUDAN, M.; BERTONI, A. Coherent electron transport in bent cylindrical surfaces. *Phys. Rev. B*, v. 72, p. 035403, Jul 2005.

[68] DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, v. 117, n. 778, p. 610–624, 1928.

[69] SAKURAI, J. *Advanced quantum mechanics*. 1st. ed. Massachusetts: Addison-Wesley, 1967.

[70] REICH, S.; MAULTZSCH, J.; THOMSEN, C.; ORDEJÓN, P. Tight-binding description of graphene. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 035412, Jul 2002.

[71] GOERBIG, M. O. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Rev. Mod. Phys.*, v. 83, p. 1193–1243, Nov 2011.

[72] PERES, N. M. R. *Colloquium*: The transport properties of graphene: An introduction. *Rev. Mod. Phys.*, v. 82, p. 2673–2700, Sep 2010.

[73] DAS SARMA, S.; ADAM, S.; HWANG, E. H.; ROSSI, E. Electronic transport in two-dimensional graphene. *Rev. Mod. Phys.*, v. 83, p. 407–470, May 2011.

[74] MOORE, J.; KANE, C. Topological insulator. *Physics World*, p. 32, February 2011.

[75] HASAN, M. Z.; KANE, C. L. *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, v. 82, p. 3045–3067, Nov 2010.

[76] BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, Washington, v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, 2006.

[77] FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 045302, Jul 2007.

[78] ZHANG, H.; LIU, C.-X.; QI, X.-L.; DAI, X.; FANG, Z.; ZHANG, S.-C. Topological insulators in $Bi_2Se_3$, $Bi_2Te_3$ and $Sb_2Te_3$ with a single dirac cone on the surface. *Nat Phys*, v. 5, p. 1745–2473, Jun 2009.

[79] QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, v. 83, p. 1057–1110, Oct 2011.

[80] WANG, X.; CHENG, Z.; XU, K.; TSANG, H. K.; XU, J.-B. High-responsivity graphene/silicon-heterostructure waveguide photodetectors. *Nat Photon*, v. 7, n. 11, p. 888–891, 11 2013.

[81] MOON, J.; CHANG SEO, H.; STRATAN, F.; ANTCLIFFE, M.; SCHMITZ, A.; ROSS, R.; KISELEV, A.; WHEELER, V.; NYAKITI, L.; GASKILL, D.; LEE, K.-M.; ASBECK, P. Lateral graphene heterostructure field-effect transistor. *Electron Device Letters, IEEE*, v. 34, n. 9, p. 1190–1192, 2013.

[82] WERNER, S. A.; STAUDENMANN, J. L.; COLELLA, R. Effect of earth's rotation on the quantum mechanical phase of the neutron. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, p. 1103–1106, Apr 1979.

[83] AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum aspects of the equivalence principle. *Foundations of Physics*, v. 3, n. 4, p. 493–498, 1973.

[84] AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum-related reference frames and the local physical significance of potentials. *Foundations of Physics*, v. 4, n. 1, p. 75–81, 1974.

[85] ANANDAN, J. Gravitational and rotational effects in quantum interference. *Phys. Rev. D*, v. 15, p. 1448–1457, Mar 1977.

[86] LANDAU, L.; LIFSHITS, E. *Mechanics*. 2nd. ed. Oxford: Pergamon, 1969.

[87] MATSUO, M.; IEDA, J.; SAITOH, E.; MAEKAWA, S. Spin-dependent inertial force and spin current in accelerating systems. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 104410, Sep 2011.

[88] HEHL, F. W.; NI, W.-T. Inertial effects of a dirac particle. *Phys. Rev. D*, v. 42, p. 2045–2048, Sep 1990.

[89] MASHHOON, B. Neutron interferometry in a rotating frame of reference. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2639–2642, Dec 1988.

[90] ZHANG, S.; LIU, W. K.; RUOFF, R. S. Atomistic simulations of double-walled carbon nanotubes (DWCNTs) as rotational bearings. *Nano Letters*, v. 4, n. 2, p. 293–297, 2004.

[91] SERVANTIE, J.; GASPARD, P. Rotational dynamics and friction in double-walled carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, p. 186106, Nov 2006.

[92] JOHNSON, R. D.; YANNONI, C. S.; DORN, H. C.; SALEM, J. R.; BETHUNE, D. S. C60 rotation in the solid state: Dynamics of a faceted spherical top. *Science*, Washington, v. 255, n. 5049, p. 1235–1238, 1992.

[93] LIANG, Q.; TSUI, O. K. C.; XU, Y.; LI, H.; XIAO, X. Effect of c60 molecular rotation on nanotribology. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 146102, Apr 2003.

[94] YAN, J.-M.; XU, Z.-J. Interaction between and rotation of c60 molecules in a c60 crystal. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, v. 312, n. 2, p. 179 – 182, 1994.

[95] STRZHEMECHNY, M. A.; KATZ, E. A. On the effect of the rotational state of c60 molecules on electronic transport in the c60 fullerite. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, v. 12, n. 1-2, p. 281–286, 2005.

[96] SHEN, J.; HE, S.; ZHUANG, F. Aharonov-carmi effect and energy shift of valence electrons in rotating c-60 molecules. *Eur. Phys. J. D*, v. 33, n. 1, p. 35–38, APR 2005.

[97] KOLESNIKOV, D. V.; OSIPOV, V. A. The continuum gauge field-theory model for low-energy electronic states of icosahedral fullerenes. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, v. 49, p. 465–470, 2006.

[98] VICKERS, J. A. G. Generalised cosmic strings. *Classical and Quantum Gravity*, v. 4, n. 1, p. 1, 1987.

[99] FURTADO, C.; MORAES, F.; CARVALHO, A. M. D. M. Geometric phases in graphitic cones. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 372, n. 32, p. 5368–5371, 2008.

[100] OSIPOV, V. Aharonov-bohm effect in planar systems with disclination vortices. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 164, n. 3â€“4, p. 327 – 330, 1992.

[101] KATANAEV, M. Geometric theory of defects. *Phys. Usp.*, v. 48, n. 7, p. 675–701, JUL 2005.

[102] KOCHETOV, E. A.; OSIPOV, V. A. Gauge theory of disclinations on fluctuating elastic surfaces. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 32, n. 10, p. 1961, 1999.

[103] NAKAHARA, M. *Geometry, topology and physics*. 2nd. ed. Bristol and Philadelphia: Institute of Physics, 2003.

[104] ABRIKOSOV, A. A. Fermion states on the sphere s2. *International Journal of Modern Physics A*, Singapore, v. 17, n. 06n07, p. 885–889, 2002.

[105] JACKSON, J. *Classical electrodynamics*. 3rd. ed. New York: Wiley, 1998.

[106] GODDARD, P.; NUYTS, J.; OLIVE, D. Gauge theories and magnetic charge. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 125, n. 1, p. 1 – 28, 1977.

[107] ZHANG, Y.; JIANG, Z.; SMALL, J. P.; PUREWAL, M. S.; TAN, Y.-W.; FAZLOLLAHI, M.; CHUDOW, J. D.; JASZCZAK, J. A.; STORMER, H. L.; KIM, P. Landau-level splitting in graphene in high magnetic fields. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 136806, Apr 2006.

[108] MAIER, R. The 192 solutions of the heun equation. *arXiv:mathCA/0408317*.

[109] VALENT, G. Heun functions versus elliptic functions. *arXiv:math-ph/0512006*.

[110] AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum aspects of the equivalence principle. *Foundations of Physics*, v. 3, p. 493–498, 1973.

[111] AHARONOV, Y.; CARMI, G. Quantum-related reference frames and the local physical significance of potentials. *Foundations of Physics*, v. 4, p. 75–81, 1974.

[112] JOHNSON, B. L. Inertial forces and the hall effect. *American Journal of Physics*, Woodbury, v. 68, n. 7, p. 649–653, 2000.

[113] AHMEDOV, B.; ERMAMATOV, M. Rotational analog of the hall effect: Coriolis contribution to electric current. *Foundations of Physics Letters*, v. 15, n. 3, p. 305–309, 2002.

[114] IMURA, K.-I.; YOSHIMURA, Y.; TAKANE, Y.; FUKUI, T. Spherical topological insulator. *Phys. Rev. B*, v. 86, p. 235119, Dec 2012.

[115] LIU, C.-X.; QI, X.-L.; ZHANG, H.; DAI, X.; FANG, Z.; ZHANG, S.-C. Model hamiltonian for topological insulators. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 045122, Jul 2010.