### Universidade de São Paulo Instituto de Física

# Efeito Casimir e as propriedades óticas de grafeno

### Ignat Fialkovskiy

Orientador: Prof. Dr. Dmitry Maximovitch Gitman

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de Física para a obtenção do título de Doutor em Ciências

### Banca examinadora

Prof. Dr. Dmitry Maximovitch Gitman

(IFUSP) - (Orientador)

Prof. Dr. Josif Frenkel - (IFUSP)

Prof. Dr. Celso Luiz Lima - (IFUSP)

Prof. Dr. José Abdalla Helayël - (CBPF)

Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho - (UFPB)

### Resumo

Este trabalho é dedicado à investigação de diferentes aspectos da física de monocamadas de grafeno suspenso e epitaxial. A descrição do grafeno é baseada no modelo quase-relativístico de Dirac. Isso permite a aplicação dos métodos da Teoria Quântica de Campos (TQC) na investigação dos efeitos de interação entre o grafeno e o campo eletromagnético (EM). Usando o formalismo de integral de trajetória, nós formulamos uma teoria efetiva do campo EM na presença de monocamadas de grafeno. Esta teoria é governada pelo operador de polarização das quase-partículas de Dirac. Dois fenômenos importantes são investigados: as propriedades óticas do grafeno (o efeito Faraday em particular) e a interação de Casimir entre uma camada de grafeno e um metal paralelo.

Em primeiro lugar, estudamos a propagação de ondas eletromagnéticas na presença de camadas de grafeno. A dinâmica de ondas é governada pelas equações modificadas de Maxwell obtidas a partir da teoria efetiva para o campo EM. Nós calculamos os coeficientes de reflexão e transmissão de luz polarizada linearmente e investigamos detalhadamente o efeito quântico de Faraday no campo magnético externo. Em particular, mostramos que as previsões do modelo de Dirac estão em boa concordância com os recentes resultados experimentais sobre a transmissão de luz e rotação de Faraday gigante em regime de ressonância cíclotron. Novos regimes também são previstos.

Em segundo lugar, investigamos a interação de Casimir entre filmes suspensos de grafeno com um condutor ideal. O efeito é investigado tanto no caso ideal (temperatura nula, amostras ideais) quanto para configurações mais realistas (temperatura não nula e a presença de potencial químico). No caso de temperatura nula, a força de Casimir entre grafeno e condutor ideal é aproximadamente 2.6% da força entre dois condutores ideais. Ao mesmo tempo, no limite de temperatura elevada, o efeito mostra—se ser muito forte — cerca de 1/2 de efeito entre metais ideais.

Os resultados da presente pesquisa foram publicados em [1] – [7].

Palavras chaves: Grafeno; teoria quântica de campos; efeito Faraday; efeito Casimir

### Abstract

This research is devoted to investigation of several aspects of the physics of suspended and epitaxial graphene monolayers. The description of graphene is based on the quase–relativistic Dirac model which permits application of the methods of the Quantum Field Theory to investigation of the interaction of graphene with electromagnetic field. Basing on the path integral formalism we formulate the effective theory for EM field in presence of graphene monolayers which is governed by the polarization operator of the Dirac quase-particles in graphene. The two main phenomena in the interaction of graphene with electromagnetic field are studied: the optical properties of graphene (the Faraday rotation in particular), and Casimir interaction between graphene samples and parallel metal.

First, we study the propagation of electromagnetic waves in presence of suspended and epitaxial graphene layers. Their dynamics is governed by the modified Maxwell equations obtained from the effective theory for EM field. We calculate the reflection and transmission coefficient for linearly polarized light and investigate in detail the quantum Faraday effect in external magnetic field. In particular we show that the prediction of the Dirac model are in good agreement with recent experimental results on transmission and giant Faraday rotation in cyclotron resonance regime. New regimes are also predicted.

Secondly, we investigate Casimir interaction between suspended graphene films and ideal conductor. The effect is investigated both in the idealistic case (zero temperature, ideal samples) and for realistic configurations (non zero temperature and/or presence of chemical potential). For zero temperature the Casimir force between graphene and a conductor is about 2.6% of that between two ideal conductors. At the same time in the high temperature limit the effect is showed to be greatly enhanced being about 1/2 of that between ideal metals.

The results of the present research are published in [1]-[7].

Keywords: graphene; quantum field theory; Faraday effect; Casimir effect.

# Sumário

1	Inti	rodução	6	
2	Des	crição da TQC do grafeno	11	
	2.1	Do Modelo de ligação forte até a EDQ $2+1$ -dimensional	11	
		2.1.1 Modelo de ligação forte	11	
		2.1.2 O Hamiltoniano de Dirac e o Lagrangiano do grafeno	13	
	2.2	Teoria efetiva para o campo eletromagnético	15	
		2.2.1 O modelo	15	
		2.2.2 Ação efetiva	16	
		2.2.3 Operador de polarização	17	
3	Pro	priedades óticas de uma monocamada de grafeno	20	
	3.1	Propagação de ondas linearmente polarizadas	21	
	3.2	Grafeno sobre um substrato	22	
	3.3	Propagação dos modos de TE e TM	24	
4	Efe	ito Faraday Quântico	27	
	4.1	Estimativas gerais	27	
	4.2	Cálculo do operador de polarização	28	
		4.2.1 EHQ no grafeno limpo	29	
		4.2.2 Impacto de impurezas	30	
		4.2.3 Renormalização	31	
	4.3	Fenomenologia	32	
		4.3.1 Grafeno epitaxial, potencial químico grande	33	
		4.3.2 Grafeno suspenso: Potencial químico moderado e pequeno	35	
5	Efe	ito Casimir à temperatura nula	38	
	5.1	Abordagem perturbativa de EDQ	38	
	5.2	Abordagem de Lifshitz para a energia de Casimir	40	
	5.3	Comportamento assintótico	41	
6	Efe	ito Casimir à temperatura não–nula	44	
	6.1	Energia livre	44	
	6.2	Limite de temperatura alta	46	
	6.3	Outros análises e os resultados numéricos	48	

7 Comentários finais 53

### Capítulo 1

# Introdução

Após o prêmio Nobel de 2010, atribuído aos Professores Novoselov e Geim, o grafeno passou a ser bem conhecido muito além da comunidade científica. Este alótropo de carbono com átomos fortemente encaixados em um retículo hexagonal (quase) bidimensional foi pela primeira vez isolado poucos anos atrás [8, 9], mas já mostrou inúmeras propriedades excepcionais. A maioria delas são discutidas em vários artigos de revisão sobre o grafeno. Para uma descrição não técnica pode-se verificar [10, 11, 12], enquanto um entendimento mais avançado pode ser encontrado em [13, 14, 15, 16].

Futuras vantagens tecnológicas são evidentes na aplicação de grafeno em eletrônica monoatômica, micro e nanotecnologia, e materiais compostos. No entanto, a física teórica vem também sendo verdadeiramente enriquecida pela investigação deste novo material.

Uma das características principais do grafeno é a estrutura de bandas eletrônicas. Para as descrever usa-se o modelo de ligação forte (veja Sec. 2.1). Como segeu desse modelo, a banda de valência (cheia) e a banda de condução (vazia) se encontram no ponto de Dirac onde são aproximadamente cônicas. As proximidades desses pontos chamam-se cones de Dirac (CD). As excitações de quase-partículas (que aparentam ser fermiônicas) acima da superfície de Fermi do grafeno possuem na vizinhança dos CD a lei linear de dispersão  $\omega = v_F k$  ( $v_F = c/300$  é a velocidade Fermi, c é a velocidade da luz no vácuo). Esta lei é válida para energias até cerca de 1 eV. A dinâmica de quase partículas de baixa energia e sua interação com o campo eletromagnético é portanto bem descrita pelo modelo de Dirac [17, 18].

Uma consequência importante da estrutura de tais bandas de grafeno é que o problema pode ser mapeado, em aproximação contínua, para o Hamiltoniano de 2 + 1-dimensoes da eletrodinâmica quântica (EDQ<sub>2+1</sub>) com férmions de Dirac<sup>1</sup>. A propagação do campo eletromagnético na presença de uma camada de grafeno é então regulada pela ação efetiva onde as excitações fermiônicas são integradas fora. A ordem mais baixa desta ação é determinada pelo operador de polarização padrão de férmions 2 + 1-dimensionais, que foi calculado em alguns trabalhos, ver discussão na Seção 2.2.2. É notável que historicamente essa abordagem da TQC para o grafeno tenha começado em [17], cerca de 20 anos antes de sua real descoberta [8, 9]. Entre as mais interessantes questões que a motivaram foi o trabalho teórico sobre a realização de anomalia de paridade na matéria condensada [19, 20, 21]. Também vale mencionar as pesquisas sobre a abor-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Note, que este mapeamento não é exato, em contraste com a  $EDQ_{2+1}$  no modelo obtido a propagação do campo EM é regida por equações de Maxwell em 3+1 dimensões.

dagem de grupo de renormalização para este sistema [22, 23] e sobre dinâmica não perturbativa da geração de intervalo de massa no grafeno [24, 25].

A prova experimental da existência de férmions de Dirac no grafeno, [26, 27] que veio da observação do Efeito Hall Quantico (EHQ) não—convencional teoricamente esperado [28, 29, 30] com fator de preenchimento quantizado

$$\sigma_{xy} = \pm \frac{2e^2}{h}(2n+1), \qquad n = 0, 1, \dots$$

tem promovido os férmions de Dirac de um belo brinquedo teórico a um objeto real, que poderá em breve fazer uma revolução em diversas áreas tecnológicas [10]. Outra previsão espetacular do modelo de Dirac é a lei universal para absorção de luz que passa através do grafeno suspenso

$$T \simeq \pi \alpha \simeq 98\%$$
.

Esta lei foi verificada experimentalmente com uma alta precisão [31] até energias mais altas que o limite original de aplicabilidade do modelo. No entanto, desvios dos cones de Dirac simples podem se tornar importantes perto das extremidades das bandas, i. e. para energias elevadas, onde os detalhes adicionais de modelo da ligação forte precisam ser considerados. Esta questão, no entanto, está fora do escopo deste trabalho.

A partir do ponto de vista da TQC, a física do grafeno apresenta situação bastante favorável para realização de experimentos de bancada para explorar as propriedades relativísticas da EDQ. Este mapeamento na EDQ também significa que a percepção obtida no estudo de férmions relativísticos pode ser implementado no estudo da física do estado sólido. Exemplos de efeitos relativísticos que poderiam ser estudados incluem o paradoxo de Klein, que trata da transmissão perfeita de elétrons através da barreira de potencial elevado [13, 32, 33] e "Zitterbewegung" ou "tremor" do centro de um pacote de ondas livres [34]. A realização experimental do grafeno necessita de maiores investigações de muitos outros efeitos relativísticos encontrados na EDQ padrão.

Seguindo a inspiração deste mapeamento, nós investigaremos neste trabalho os aspectos 3+1—dimensionais da física do grafeno, notadamente a sua influência sobre a propagação do campo eletromagnético externo (clássico) e dos efeitos de polarização de vácuo nas imediações da superfície do grafeno, ou seja o efeito Casimir.

Para explorar esses efeitos nós usamos a abordagem da teoria quântica de campos para a física do grafeno. Ou seja, começamos com a ação de Dirac-Maxwell, onde os espinores são confinados na superfície do grafeno, enquanto o campo eletromagnético habita o espaço 3+1-dimensional. O campo eletromagnético não é quantizado, é dado pela soma de um campo magnético constante (quando houver) e fótons flutuantes. Calculando a ação efetiva devemos manter apenas os termos de segunda ordem nos fótons, enquanto o campo magnético de fundo será levado em conta exatamente. Portanto, na parte da teoria quântica de campos nós investigamos um diagrama de um loop embora bastante complicado. No caso mais elaborado, os propagadores que formam o loop dependem do campo magnético, do potencial químico, da massa, e de um parâmetro fenomenológico que descreve as impurezas.

As propriedades óticas da monocamada de grafeno desde o início provaram ser extraordinárias. A primeira medida [31] da absorção ótica no grafeno surpreendentemente revelou um grande efeito — as camadas monoatômicas absorveram cerca de 2,3% da luz incidente, exatamente como previsto pelo modelo de Dirac, veja [35, 36, 37, 38].

Desde então, a quantidade e a qualidade dos dados magneto-óticos experimentais foram sempre crescentes. No caso de amostras de grafeno de multicamadas, as primeiras medições de espectros de transmissão foram reportadas em [39], e o trabalho foi mais tarde continuado em uma série de artigos, por exemplo [40, 41]. Mais recentemente, a transmissão e a rotação de Faraday em mono e multicamadas de grafeno epitaxial foram medidos em [42]. A rotação de Faraday pareceu ser inesperadamente grande e foi apelidada de Efeito Faraday gigante. A configuração experimental de [42] permitiu uma investigação detalhada do regime chamado de ressonância cíclotron, e as medidas foram ajustadas usando o modelo de Drude para condutividade do grafeno.

Do lado teórico, as propriedades magneto-óticas de monocamadas de grafeno têm sido exaustivamente estuidadas pelo grupo de Kiev, [43]–[48], e também foram assunto de alguma simulação numérica, [49]. No entanto, nenhum trabalho anterior explorou o modelo de Dirac por completo para relacionar as propriedades óticas do grafeno aos seus parâmetros microscópicos.

No presente trabalho pretendemos preencher essa lacuna com foco no efeito Faraday. Ele pode ser imaginado como um análogo do efeito Hall considerado em frequências não nulas, e esta semelhança foi utilizada em Ref. [50] para conjecturar que o efeito Faraday deve ser comum para os sistemas de Hall. No nosso trabalho Ref. [1] a rotação de Faraday foi relacionada à possível não compensação das partes ímpares do tensor de polarização entre várias gerações de férmions. Mais tarde, considerou-se o grafeno descrito pelo modelo de Dirac completo no campo magnético externo [7].

Nossa abordagem permitiu tanto encaixar muito bem os resultados de [42], quanto investigar novos regimes, onde a rotação de Faraday e a absorção são bem notáveis. Em particular, revelamos a quantização do ângulo de Faraday para amostras limpas, e previmos picos de frequências relativamente elevadas.

A outra parte do nosso trabalho é dedicada ao efeito Casimir [51], e em parte se baseia nos resultados da investigação das propriedades óticas de grafeno.

Em separações pequenas, próximas ao contato, a interação entre uma amostra de grafeno e qualquer corpo sólido (condutor, dielétrico, ou outra amostra de grafeno) é devido às forças de Van der Waals. Em separações maiores, digamos da ordem de dezenas de nanômetros ou mais, as forças de Casimir, isto é, as forças retardadas de Van der Waals<sup>2</sup>, entram em ação (veja exemplo [52, 53, 54]). Tais distâncias são características de dispositivos em nano escala onde o grafeno deve ser de maior importância, e esta interação mostrou ser importante neste caso [55].

Foi em 1948 que K. Casimir previu [51] uma interação atrativa entre um par de placas metálicas paralelas neutras no vácuo. Casimir também deu uma explicação simples, porém profunda, para a interação como uma manifestação da energia de ponto zero de um campo quantizado. Na situação ideal, em temperatura nula, por exemplo, não há fótons reais entre as

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>O nome da força de "Van der Waals" às vezes é usado como sinônimo de "força de Casimir", mas normalmente se refere ao regime onde os objetos estão suficiente próximos uns dos outros, que a velocidade da luz é efetivamente infinita, isto é, desprezando os efeitos de retardamento.

placas. Portanto, é apenas o vácuo, isto é, o estado fundamental da eletrodinâmica quântica que faz com que as placas se atraiam. Notoriamente, é um efeito quântico puro, não existem tais forças entre as placas (assumidas como sendo neutras) na eletrodinâmica clássica. É notável que este efeito quântico se manifeste macroscopicamente produzindo uma força finita

$$F(a) = -\frac{\pi^2 S}{240a^4},$$

aqui a é separação entre as placas, S é a sua área, e colocamos  $\hbar = c = 1$ . O efeito Casimir tem sido objeto de medição experimental preciso, por exemplo [56, 57, 58]. Veja [52, 53, 54] para os últimos comentários sobre o status teórico e experimental do efeito.

Há pontos de vista teóricos complementares sobre esse efeito. De um lado, notamos que qualquer material que se acopla ao campo eletromagnético altera o espectro de flutuações quânticas (e térmicas) do campo, efeito que normalmente é chamado de polarização do vácuo. A variação resultante de energia depende da posição relativa dos objetos, levando a força atrativa de Casimir. De outro lado, pode-se considerar a causa dessas forças como sendo cargas e correntes virtuais, que flutuam dentro e fora da existência nos objetos devido à mecânica quântica.

Esta última abordagem foi desenvolvida por Lifshitz, Dzyaloshinskii, e Pitaevskii, e se estendia ao resultado de Casimir para placas paralelas através da incorporação de temperatura, permissividade e permeabilidade diferentes de zero em uma fórmula geral para a pressão sobre dois semi-espaços infinitos separados por um intervalo, [59, 60, 61]. Para tal, a energia livre para duas placas paralelas dielétricas foi relacionada às permissividades dielétricas, para frequência imaginária. A energia de interação das duas interfaces planas paralelas foi expressa apenas através dos coeficientes de reflexão dos modos eletromagnéticos transversal elétrico (TE) e transversal magnético (TM) em cada uma das superfícies [62]. Em alguns trabalhos posteriores [63, 64] a ligação entre as duas abordagens foi estabelecida e a generalização da fórmula de Lifshitz foi apresentada. Assim, foi estabelecida uma conexão entre a propagação clássica de ondas EM na presença de interfaces de materiais e o problema puramente quântico do cálculo da energia de Casimir. Vamos explorar essa conexão em toda a sua glória nos capítulos 5 e 6.

Consideramos a mesma geometria como no efeito Casimir original (2 planos paralelos) com um plano sendo grafeno e o outro um condutor ideal. Esta configuração foi considerada primeiro em [65, 66, 67] utilizando um modelo hidrodinâmico para os elétrons no grafeno seguindo [68, 69]. Mais tarde tornou-se claro que este modelo não descreve as propriedades eletrônicas específicas deste novo material. A interação do metal com o grafeno em distâncias muito menores do que as distâncias de Casimir foram também investigadas nos artigos [70] usando técnicas de funcional de densidade. A interação térmica de Casimir entre camadas de grafeno foi recentemente calculada em [71] em uma abordagem do tipo Van der Waals, ou seja, baseando-se nas funções de Green não-retardadas.

Mais recente, em [72] no âmbito do modelo de Dirac quase—relativístico verificou—se que a interação de Casimir entre duas camadas de grafeno suspenso se fortalece à temperatura elevada devido à resposta plasmônica na camada de grafeno. Em outro artigo, Ref. [73], onde o grafeno foi modelado por uma combinação de osciladores de tipo de Lorentz, praticamente nenhuma dependência na temperatura da força de Casimir foi encontrada. Por outro lado, a dependência

na temperatura da interação de Casimir atrai muita atenção devido ao problema não resolvido de suas assíntotas para os metais em grandes separações e temperaturas finitas [74, 75, 76, 77, 78, 79].

Tudo isto exige uma investigação detalhada do efeito Casimir em sistemas de grafeno com base em um modelo teóricamente razoável — o de Dirac. Estudamos o caso de temperatura nula, e também um mais realista, onde incluímos flutuações térmicas, bem como o potencial químico para as excitações eletrônicas em grafeno. Começamos aplicando a abordagem perturbtaiva da TQC e expressamos a energia de Casimir como um diagrama de um loop de férmions à temperatura nula. Em seguida, usamos os coeficientes de reflexão TE/TM obtidos no Capítulo 3 para investigar as propriedades da energia livre de Lifshitz. Em particular, mostramos, que em temperatura nula os resultados de ambas abordagens estão em uma concordância razoável, prevendo a força de Casimir entre o grafeno e um condutor ideal a ser por volta de 2.6% da força entre dois condutores. Também investigamos em detalhes os casos de temperaturas diferentes de zero. Demos uma atenção especial ao regime de temperatura elevada (longa distância) e construímos rigorosamente a assíntota correspondente. Isso mostra que a interação de Casimir entre uma amostra de grafeno e um condutor paralelo, neste caso, tende a ser apenas metade da interação entre dois metais — uma força surpreendentemente forte para um material monoatômico.

Os resultados aqui apresentados foram publicados em uma série de artigos escritos pelo aluno e supervisor com coautores [1]-[7].

O trabalho está organizado da seguinte forma.

Começamos lembrando o leitor do modelo de ligação forte para o grafeno, e derivando a aproximação de contínuo de baixa energia no Capítulo 2. Em seguida, investigamos as propriedades óticas de camadas de grafeno derivando no Capítulo 3 as expressões gerais para os coeficientes de reflexão e transmissão. Estes coeficientes não apenas descrevem a propagação da luz clássica no sistema, mas também podem ser utilizados no cálculo do efeito Casimir nos Capítulos 5 e 6. No Capítulo 4, investigamos as propriedades óticas de amostras de uma monocamada de grafeno no campo magnético externo. Nós realizamos a comparação das previsões do modelo de Dirac com experimento, bem como previmos novos regimes, onde a rotação de Faraday é ainda macroscópica.

No Capítulo 5 estudamos a interação Casimir entre a amostra de grafeno suspenso e o condutor ideal à temperatura nula. Finalmente, no Capitulo 6 realizamos uma investigação detalhada da dependência na temperatura da interação de Casimir em tais sistemas revelando em particular suas assíntotas de temperaturas altas.

Concluímos o trabalho com um resumo onde todos os nossos principais resultados são descritos

No que se segue adotamos  $\hbar = c = k_B = 1$ .

### Capítulo 2

# Descrição da TQC do grafeno

### 2.1 Do Modelo de ligação forte até a EDQ 2+1-dimensional

Nesta seção vamos rever rapidamente a construção de Lagrange para quase—partículas em grafeno no limite do contínuo de baixa energia. Assim, vamos seguir [44].

#### 2.1.1 Modelo de ligação forte

Os átomos de carbono no grafeno estão dispostos em um retículo hexagonal, ver Fig. 2.1 a. Ele pode ser descrito em termos de dois subretículos triangulares, A e B, que são inequivalentes cristalograficamente. Uma célula unitária de todo retículo contém dois átomos, um do tipo A e um do tipo B. Os vetores

$$\mathbf{a}_1 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right),$$
 (2.1)

são translações primitivas, a — constante de rede. O correspondente retículo recíproco cujos vetores são  $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,1/\sqrt{3})$  e  $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,-1/\sqrt{3})$  é mostrado na Fig. 2.1 b bem como a zona de Brillouin reduzida (simétrica e estendida). Os vetores recíprocos satisfazem a relação  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ .

Qualquer átomo A na posição  $\mathbf{n} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2$ , onde  $n_1, n_2$  são inteiros, é conectado a seus

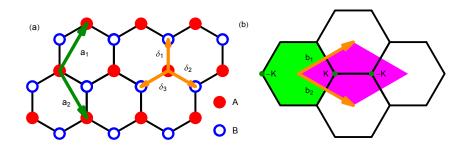


Figura 2.1: (a) Retículo hexagonal de grafeno construído como uma superposição de duas grades triangulares A e B, com vetores de base  $\mathbf{a}_{1,2}$  para retículo A e vetores  $\boldsymbol{\delta}_i, i=1,2,3$  conectando A a B. (b) O hexágono é a zona de Brillouin (ZB), e o diamante é a ZB extendida do retículo hexagonal. Os vetores de retículo recíproco são  $\mathbf{b}_1$  e  $\mathbf{b}_2$ .

vizinhos mais próximos em sítios B por três vectores  $\boldsymbol{\delta}_i$ :

$$\delta_1 = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3, \quad \delta_2 = \mathbf{a}_1/3 + 2\mathbf{a}_2/3, \quad \delta_3 = -\delta_1 - \delta_2 = -2\mathbf{a}_1/3 - \mathbf{a}_2/3.$$
 (2.2)

Os átomos de carbono no plano do grafeno estão conectados por ligações— $\sigma$  fortes covalentes ao longo destes vetores devido a hibridação  $sp^2$  dos orbitais atômicos  $2s, 2p_x, 2p_y$ . Os orbitais  $2p_z$  ( $\pi$ ) são perpendiculares ao plano e têm uma fraca sobreposição. No modelo mais simples, se supõe que esses elétrons fracamente acoplados podem 'pular' de um átomo (no ponto  $\mathbf{n}$ ) para um dos seus três vizinhos mais próximos (seguindo um dos vetores  $\boldsymbol{\delta}_i$ ). Esse salto pode ser descrito por um parâmetro único de energia, t, enquanto a interação spin—órbita pode ser negligenciada neste nível de análise. Há uma dedução mais detalhada e rigorosa, baseada nas propriedades de funções de Bloch, veja p. ex. [18, 80], mas para nossos propósitos, esta abordagem é suficiente.

Portanto, vamos começar com a descrição de ligação forte mais simples para orbitais  $\pi$  do carbono em termos do Hamiltoniano

$$H = -t \sum_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\delta}_{i}, \sigma} \left[ a_{\mathbf{n}, \sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{n} + \boldsymbol{\delta}, \sigma} + \text{c.c.} \right], \tag{2.3}$$

onde t é o parâmetro de salto para o vizinho mais próximo, e  $a_{\mathbf{n},\sigma}$  e  $b_{\mathbf{n},\sigma}$  são os operadores de criação de elétrons no sítio  $\mathbf{n}$  com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  nos subreticulos A e B respectivamente. Note que consideramos um modelo 2D.

Na representação de momento, transformamos os operadores dos elétrons como  $a_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta},\sigma} \to e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}}a_{\sigma}(\mathbf{k})$ , e o hamiltoniano H se torna

$$H = \sum_{\sigma} \int_{ZB} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Upsilon_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \mathcal{H} \Upsilon_{\sigma}(\mathbf{k}), \qquad \mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \phi(\mathbf{k}) \\ \phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}$$
(2.4)

com  $\phi(\mathbf{k}) = -t \sum_{\delta_i} e^{i\mathbf{k}\delta_i} \equiv -\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\varphi(\mathbf{k})}$ . Na base (2.1) obtemos

$$\phi(\mathbf{k}) = -te^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3} \left[ 1 + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} \right]$$

$$= -t \left[ \exp\left(i\frac{k_y a}{\sqrt{3}}\right) + \exp\left(-i\frac{k_y a}{2\sqrt{3}}\right) 2\cos\frac{k_x a}{2} \right]$$
(2.5)

e, portanto

$$\epsilon(\mathbf{k}) = t\sqrt{1 + 4\cos^2\frac{k_x a}{2} + 4\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}}.$$
 (2.6)

Por conseguinte, o espectro de excitações das quase partículas tem duas ramificações (bandas) com a dispersão [85]  $E_{\pm} = \pm \epsilon(\mathbf{k})$  mostrados na Fig. 2.2.

Na Eq. (2.4) introduzimos os espinores

$$\Upsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} a_{\sigma}(\mathbf{k}) \\ b_{\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$
 (2.7)

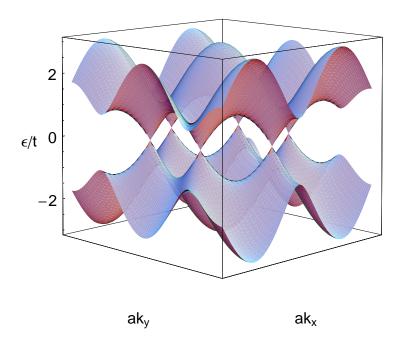


Figura 2.2: A estrutura de bandas de energia do grafeno. Bandas de valência e condução encontram-se em seis pontos  $\mathbf{K}$ .

onde os operadores  $\Upsilon_{\sigma}(\mathbf{k})$  são a transformação de Fourier do spinor  $\Upsilon_{\sigma}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{n},\sigma} \\ b_{\mathbf{n},\sigma} \end{pmatrix}$ :

$$\Upsilon_{\sigma}(\mathbf{n}) = \sqrt{S} \int_{ZB} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} \Upsilon_{\sigma}(\mathbf{k}). \tag{2.8}$$

Aqui  $S = \sqrt{3}a^2/2$  é a área de uma célula unitária e a integração nas equações (2.4) e (2.8) ocorre sobre a zona de Brillouin extendida.

A dispersão  $\epsilon(\mathbf{k})$  é linear próximo aos seis pontos-K nos cantos da ZB hexagonal  $\mathbf{K} = \pm 2\pi/a(1/3,1/\sqrt{3}), \pm 2\pi/a(2/3,0), \pm 2\pi/a(1/3,-1/\sqrt{3})$  (consulte a Fig. 2.2)

$$E_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{p}|,$$

onde o vetor de onda  $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$  agora é medido a partir dos pontos- $\mathbf{K}$  e a velocidade de Fermi é  $v_F = \sqrt{3}ta/(2\hbar)$ . Seu valor experimental [26, 27] é  $v_F \approx 10^6 \mathrm{m/s}$ .

Como apenas dois pontos-**K** são inequivalentes (todos os outros podem ser obtidos por translação), no que se segue, podemos selecioná-los para serem  $\mathbf{K}_{\pm} = \pm 2\pi/a(2/3,0)$  (ver Fig. 2.1 b), para que eles fiquem dentro da ZB extendida.

### 2.1.2 O Hamiltoniano de Dirac e o Lagrangiano do grafeno

Em torno desses dois pontos  $\mathbf{K}_{\pm}$ , a função (2.5) pode ser expandida como  $\phi(\mathbf{K}_{\pm}+\mathbf{p}) = \pm \hbar v_F(p_1 \mp ip_2)$ , para que o Hamiltoniano (2.4) seja linearizado [17, 18]. Em termos de espinores de 4

componentes  $\Psi_{\sigma}(\mathbf{p})$  construidos a partir de dois espinores para os pontos  $\mathbf{K}_{\pm}$ 

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \Upsilon_{\mathbf{K}_{+},\sigma}(\mathbf{p}) \\ \Upsilon_{\mathbf{K}_{-},\sigma}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{\sigma}(\mathbf{K}_{+} + \mathbf{p}) \\ b_{\sigma}(\mathbf{K}_{+} + \mathbf{p}) \\ b_{\sigma}(\mathbf{K}_{-} + \mathbf{p}) \\ a_{\sigma}(\mathbf{K}_{-} + \mathbf{p}) \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

a versão linearizada do Hamiltoniano (2.4) adquire a forma

$$H_{0} = \hbar v_{F} \sum_{\sigma} \int_{CD} \frac{d^{2}p}{(2\pi)^{2}} \quad \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}) \begin{pmatrix} 0 & p_{x} - ip_{y} & 0 & 0 \\ p_{x} + ip_{y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_{x} + ip_{y} \\ 0 & 0 & -p_{x} - ip_{y} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{p}) \quad (2.10)$$

A integração na Eq. (2.10) é feita sobre o cone de Dirac (CD) e o cut-off de energia que preserva o número de estados é

$$W = \hbar v_F \sqrt{\frac{\Omega_B}{2\pi}} = \frac{\hbar v_F}{a} \sqrt{\frac{4\pi}{\sqrt{3}}} = \sqrt{\pi\sqrt{3}}t \approx 2.33t, \tag{2.11}$$

onde  $\Omega_B = (2\pi)^2/S$  é a área da ZB.

Para concluir o mapeamento do modelo de ligação forte do grafeno na EDQ, notamos que, em termos de matrizes gamma, o Hamiltoniano (2.10) pode ser dividido em um par de representações espinorias bidimensionais da álgebra de Clifford em 2+1–dimensões. Eles diferem entre si apenas pelo sinal global. Constatamos também que a somatória sobre o índice de spin real  $\sigma$  só dá uma degeneração adicional de 2 vezes. Assim, o número total de 'espécies de férmions' no grafeno são 4 — duas representações inequivalentes da álgebra de Clifford vezes dois spins. Para cada um deles o hamiltoniano toma exatamente a forma de Dirac

$$H_0 = \hbar v_F \int_{DC} \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \bar{\psi}(\mathbf{p}) \left( \gamma^1 p_1 + \gamma^2 p_2 \right) \psi(\mathbf{p}), \tag{2.12}$$

onde introduzimos o espinores conjugados de Dirac  $\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \psi^{\dagger}(\mathbf{p})\gamma^{0}$ . As matrizes  $\gamma^{i}$  com i = 0, 1, 2 satisfazem as relações de anticomutação usuais

$$\{\gamma^i, \gamma^j\} = 2g^{ij}, \quad g^{ij} = (1, -1, -1), \quad i, j = 0, 1, 2,$$
 (2.13)

escolhemos

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

A partir do Hamiltoniano (2.10), podemos construir de forma padronizada a densidade Lagrangiana. Em representação de coordenadas, este toma a forma de

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(t, \mathbf{r}) \left[ i\gamma^0 D_0 + iv_F \gamma^1 D_1 + iv_F \gamma^2 D_2 \right] \psi(t, \mathbf{r}). \tag{2.15}$$

Com  $D_i = \partial_i + ieA_i$ , i = 0, 1, 2 introduzimos, explicitamente, a interação com o campo eletromagnético do único modo possível a preservar a invariância de calibre. Note a dependência na velocidade de Fermi  $v_F$ , que substitui no grafeno a velocidade padrão da luz c.

A explicação teórica dos experimentos básicos [26, 27] foi fundada sobre a Lagrangiana de Dirac (2.15), provando assim que quase partículas de Dirac existem sim no grafeno. Para campos magnéticos menores de 10 T, não é necessário incluir o termo Zeeman [81]. No entanto, para campos mais elevados a interação entre quase partículas no grafeno pode desempenhar um papel importante, ver [81, 82, 83].

### 2.2 Teoria efetiva para o campo eletromagnético

Nesta seção construiremos a teoria quântica efetiva para o campo eletromagnético em aproximação de um loop. Para tal utilizaremos o formalismo da integral funcional baseado na ação de Dirac discutida na parte anterior do trabalho.

#### 2.2.1 O modelo

Vamos agora formular o modelo. Supomos que uma única camada de grafeno é colocada em  $x^3 = 0$ , enquanto o campo eletromagnético se propaga no espaço ambiente 3 + 1-dimensional. A interação de quase-partículas fermiônicas no grafeno com campo externo EM é implementada em uma forma mínima que é invariante de calibre. Assim, seguindo (2.15) o funcional completo de ação do sistema em questão é dada por

$$S = -\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^2 + \int d^3x \, \bar{\psi} \left( D - \Delta + \ldots \right) \psi$$
 (2.16)

aqui  $F_{\mu\nu}$  representa o tensor padrão de campo EM  $F_{\mu\nu}=\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu},\ d^3x=dx^0dx^1dx^2,$   $d^4x=d^3xdx^3$ 

$$D = i\partial - eA_m(x^3 = 0) \tag{2.17}$$

onde  $\emptyset \equiv \tilde{\gamma}_m \partial^m$ , etc. As matrizes gamma nas fórmulas acima são redimensionadas refletindo a diferença da velocidade da luz no interior das amostras de grafeno

$$\tilde{\gamma}^0 \equiv \gamma^0, \quad \tilde{\gamma}^{1,2} \equiv v_F \gamma^{1,2}, \qquad \gamma_0^2 = -(\gamma^{1,2})^2 = 1.$$
 (2.18)

Como mencionado anteriormente, existem quatro espécies de férmions no grafeno. Para levar isso em conta pode—se considerar as matrizes gamma como sendo  $8 \times 8$ , como uma soma direta de quatro representações  $2 \times 2$ . No entanto, no nosso nível de analise (sem nenhuma interação explícita entre espécies) representações diferentes resultarão em previsões iguais. Portanto, levamos em conta a degeneração correspondente através da introdução de um fator de multiplicidade N=4 nas fórmulas apropriadas.

A ação de Maxwell é normalizada de tal forma que

$$e^2 \equiv 4\pi\alpha = \frac{4\pi}{137}.$$
 (2.19)

Os pontos em (2.16) denotam outros parâmetros, como potencial químico, ou campo magnético

externo, consulte [44] para uma lista bastante completa de interações permitidas e explicações do seu significado físico. Nos capítulos a seguir, vamos considerar o papel de alguns desses parâmetros.

Até agora, mantivemos explicitamente somente o parâmetro de massa  $\Delta$  para enfatizar a importância da descrição da TQC do grafeno. O valor de  $\Delta$  e mecanismos de sua geração estão sob árdua discussão [24, 25, 43, 45, 46]. Ainda assim, é geralmente aceito que o limite superior de  $\Delta$  seja por volta de 0.1eV, mas é provavelmente muito menor. Devido ao tamanho pequeno da massa, as quase— partículas apresentam um comportamento relativístico a energias bastante pequenas, e este faz da TQC uma linguagem mais adequada para descrever o grafeno do que a mecânica quântica.

#### 2.2.2 Ação efetiva

As propriedades do campo eletromagnético (ambas clássicas e quânticas) na presença de uma única camada do grafeno pode ser deduzidas a partir da função de partição (o gerador funcional das funções de Green) que, no formalismo da integral funcional, é dado por

$$Z = N \int D[A\psi\bar{\psi}] e^{iS} \tag{2.20}$$

com S de (2.16). A integração aqui ocorre sobre todas as possíveis configurações do campo, e N é uma constante de normalização apropriada. Dependendo da natureza do problema em questão, pode—se decompor o potencial eletromagnético em uma parte clássica e em outra flutuante, consulte (2.28), ou equipar o potencial EM com condições de fronteira. Assim, ao considerar no Capítulo 5 o efeito Casimir entre grafeno e um metal ideal, vamos impor as condições de fronteira em  $x^3=a$ 

$$A_0|_{x^3-a} = A_1|_{x^3-a} = A_2|_{x^3-a} = \partial_3 A_3|_{x^3-a} = 0.$$
 (2.21)

Em qualquer caso, para a definição adequada do integração fucnional, tem—se que realizar a fixação de calibre. No entanto, no caso a ser considerado, pode-se usar a calibre de Feynman onde não aparece nenhuma contribuição dos campos fantasmas.

Para obter uma teoria efetiva para o campo EM, deve—se primeiro eliminar via integração os graus de liberdade férmiônicos

$$Z = N' \int DA \, e^{i\left(-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^2 + \Gamma(A)\right)} \tag{2.22}$$

onde formalmente

$$\Gamma(A) = \frac{1}{i} \ln \left( \frac{\det(i\partial \!\!\!/ - \Delta - e \!\!\!/ A)}{\det(i\partial \!\!\!/ - \Delta)} \right). \tag{2.23}$$

Para definir o determinante funcional primeiro notamos, que

$$\ln \frac{\det(i\partial\!\!\!/ - \Delta - e\!\!\!/ A)}{\det(i\partial\!\!\!/ - \Delta)} = \operatorname{Tr} \ln \left( 1 - \frac{1}{i\partial\!\!\!/ - \Delta} e\!\!\!/ A \right),$$

o que nos permite expandir essa expressão assumindo que o campo eletromagnético é pequeno

$$\operatorname{Tr} \ln \left( 1 - \frac{1}{i \partial \!\!\!/ - \Delta} e \!\!\!/ A \right) \simeq - \operatorname{Tr} \left( \frac{1}{i \partial \!\!\!/ - \Delta} e \!\!\!/ A \right) - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left( \frac{1}{i \partial \!\!\!/ - \Delta} e \!\!\!/ A \right) + \dots$$
 (2.24)

O primeiro termo desta expansão — o diagrama de tadpole, pode ser renormalizado para zero (tal possibilidade é garantida pelo teorema de Fari). Então, para a ação efetiva, temos na aproximação quadrática

$$\Gamma(A) \simeq \frac{i}{2} \operatorname{Tr} \left( \frac{1}{i \partial \!\!\!/ - \Delta} e \!\!\!/ A \frac{1}{i \partial \!\!\!/ - \Delta} e \!\!\!/ A \right) = A \sim \sim A$$

$$= \frac{1}{2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} A_m(p) \Pi^{mn}(p) A_n(-p) \qquad (2.25)$$

O operador de polarização,  $\Pi^{mn}(p)$ , em linguagem diagramática é um loop de férmions em 2+1 dimensões, como mostrado acima. Para obter detalhes sobre notações diagramáticas consulte [114].

No espaço de impulso ele pode ser representado como

$$\Pi^{mn}(p_0, \mathbf{p}) = ie^2 \int \frac{dq_0 d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \operatorname{tr}\left(\hat{S}(q_0, \mathbf{q})\tilde{\gamma}^m \hat{S}(q_0 - p_0, \mathbf{q} - \mathbf{p})\tilde{\gamma}^n\right), \tag{2.26}$$

onde  $\hat{S}$  denota o propagador de férmions. Para as quase–partículas no grafeno, é dado por

$$\hat{S}(q_0, \mathbf{q}) \equiv \mathcal{D}^{-1}|_{A_{\mu}=0} = -\frac{q_0 \gamma_0 - v_F \mathbf{q} - \Delta}{(q_0 + i\epsilon \operatorname{sgn} q_0)^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2 - \Delta^2}.$$
 (2.27)

onde introduzimos a prescrição- $\epsilon$  de Feynman. Note que, devido à natureza quase-relativística das excitações no grafeno,  $\hat{S}$  também depende na velocidade de Fermi  $v_F$ . Aqui  $\mathbf{q}^j = (q^1, q^2)$ ,  $\mathbf{q} = \gamma^1 q_1 + \gamma^2 q_2$ .

Nas seções a seguir estaremos interessados no espalhamento da luz por uma folha de grafeno, colocada em um forte campo eletromagnético externo. Neste caso é conveniente dividir o potencial eletromagnético (2.23) em um campo de fundo e uma parte de flutuações quanticas

$$A_{\mu} \to A_{\mu}^{\rm b} + A_{\mu}.$$
 (2.28)

No caso do efeito Faraday a parte do fundo  $A_{\mu}^{\rm b}$  descreve um campo magnético constante **B** perpendicular à placa de grafeno, enquanto  $A_{\mu}$  são os fótons. A parte de fundo tem de ser levada em conta exatamente, enquanto a expansão em (2.24) é em ordem de  $A_{\mu}$ .

Assim, o operador de polarização  $\Pi_{mn}$  torna-se dependente de  $A^{\rm b}$  através do propagador de férmions  $\hat{S} = (\cancel{D}(A^{\rm b}))^{-1}$ .

$$\Pi^{mn}(p) \to \Pi^{mn}\left(p, A^b\right)$$
.

#### 2.2.3 Operador de polarização

O operador de polarização foi calculado em inúmeros artigos, para muitos conjuntos de parâmetros diferentes, começando com [84], e mais recente em, e. g., [25, 43, 45, 46], também veja abaixo. O interesse original neste problema de TQC tem sido motivado por uma investigação

teórica da anomalia de paridade — um fenômeno específico para sistemas em 2+1 dimensões. É caracterizada pelo aparecimento, no caso sem massa,  $\Delta = 0$ , de um termo de paridade ímpar (de Chern-Simons, consulte (2.29)) no operador de polarização, apesar da ação original (2.16) ser par neste caso.

Para os férmions quase-relativísticos no grafeno, a estrutura tensorial do operador de polarização pode ser deduzida a partir de fundamentos gerais. Na verdade, devido à transversalidade (invariância de calibre) e da simetria de Lorenz, ele deve ter a seguinte forma

$$\Pi^{mn} = \frac{\alpha}{v_F^2} \eta_j^m \left[ \Phi(\tilde{p}) \left( g^{jl} - \frac{\tilde{p}^j \tilde{p}^l}{\tilde{p}^2} \right) + i\phi(\tilde{p}) \epsilon^{jkl} \tilde{p}_k \right] \eta_l^n$$
 (2.29)

aqui  $\epsilon^{jkl}$  é o tensor de Levi-Civita,  $\epsilon^{012}=1$ . A partir de (2.16) é claro que, devido à presença da velocidade bidimensional efetiva da luz  $v_F$ , correções quânticas devem depender do momento redimensionado  $\tilde{p}$  em vez de p. Isto se reflete na construção dentro dos parênteses em (2.29) que reproduz a estrutura padrão tensorial do tensor de polarização, mas com p substituído por  $\tilde{p}$ . O fator  $v_F^{-2}$  aparece devido à relação  $d^3q=v_F^{-2}d^3\tilde{q}$  para a medida de integração sobre o momento de loop. Os redimensionamentos globais  $\eta_i^m$  do operador de polarização aparecem desde que o potencial eletromagnético também seja multiplicado por matrizes gamma redimensionadas (2.18), veja (2.17). Vale a pena mencionar que o tensor de polarização é transversal em relação aos momentos não-redimensionados,  $p_n\Pi^{nm}(p)=0$ , como esperado da invariância de calibre "usual" do modelo.

As funções  $\Phi$  e  $\phi$  dependem do modelo e podem tomar valores complexos. A forma exata das funções  $\Phi(p)$  e  $\phi(p)$  tem sido considerada em vários modelos e em vários casos particulares, alem dos trabalhos mencionados encima consulte também [86, 87, 88]. A função Φ foi pela primeira vez calculada explicitamente no âmbito da EDQ em 2+1d em [84]. Em conexão com o grafeno ela foi apresentada em [25] para um modelo EDQ semi-relativístico reduzido contendo três parâmetros (massa, temperatura e potencial químico). Mais tarde ela foi generalizada para incluir também a taxa de espalhamento e o campo magnético externo em [43], e recentemente rederivada em [46].

No caso mais simples, as funções  $\Phi$  e  $\phi$  em (2.29) são dadas por

$$\Phi(p) = \frac{2\Delta \tilde{p} - (\tilde{p}^2 + 4\Delta^2)\operatorname{arctanh}(\tilde{p}/2\Delta)}{2\tilde{p}},$$

$$\phi(p) = \frac{2\Delta \operatorname{arctanh}(\tilde{p}/2\Delta)}{\tilde{p}} - 1$$
(2.30)

$$\phi(p) = \frac{2\Delta \operatorname{arctanh}(\tilde{p}/2\Delta)}{\tilde{p}} - 1 \tag{2.31}$$

aqui  $\tilde{p} \equiv +\sqrt{\tilde{p}_i\tilde{p}^j}$ , e assumimos  $\Delta \geqslant 0$ . Lembramos que o termo -1 em (2.31) é um resultado da subtração de Pauli-Villars, que é necessária para restaurar completamente a invariância de calibre da ação efetiva [86].

Previsões para a absorção de luz na parte visível do espectro com base em cálculos da parte par da função de polarização neste modelo mais simples já estão em um bom acordo com os dados experimentais [31, 89], ver também Capítulo 3 abaixo. Para considerações do Capítulo 4 precisamos também de um modelo mais complicado descrevendo os processos óticos em amostras realistas, em especial onde há uma densidade não nula de portadores de carga no grafeno e a temperaturas diferentes de zero.

No último caso é preciso dois componentes independentes para a definição completa da parte par do operador de polarização. Na presença de um meio caracterizado pela velocidade u tem—se [90]

$$\Pi^{mn} = \frac{1}{v_F^2} \eta_j^m \left[ \Pi_0^{ji} A(p_0, \mathbf{p}) + p_0^2 \Pi_u^{ji} B(p_0, \mathbf{p}) \right] \eta_i^n$$

$$\Pi_0^{ji} = g^{ji} - \frac{\tilde{p}^j \tilde{p}^i}{\tilde{p}^2}, \quad \Pi_u^{ji} = \frac{\tilde{p}^j \tilde{p}^i}{\tilde{p}^2} - \frac{\tilde{p}^j u^i + u^j \tilde{p}^i}{(\tilde{p}u)} + \frac{u^j u^i}{(\tilde{p}u)^2} \tilde{p}^2$$
(2.32)

onde A, B são funções escalares.

Na referencial de repouso de meio u=(1,0,0), as funções escalares A,B podem ser expressas através do componente temporal do operador de polarização e seu traço, da seguinte maneira  $(p_3^2 \equiv p_0^2 - \mathbf{p}^2, \, \tilde{p}_3^2 \equiv p_0^2 - v_F^2 \mathbf{p}^2)$ 

$$A = \frac{p_3^2}{\mathbf{p}^2} \Pi_{00} + \Pi_{\text{tr}}, \quad B = \frac{1}{v_F^2 \mathbf{p}^2} \left( \frac{p_3^2 + \tilde{p}_3^2}{\mathbf{p}^2} \Pi_{00} + \Pi_{\text{tr}} \right). \tag{2.33}$$

Claramente, podemos expressar A, B por meio de qualquer par de componentes de  $\Pi$ . Escolhemos  $\Pi_{\rm tr} \equiv \Pi_m^m$  and  $\Pi_{00}$  por conveniência em cálculos futuros. O cálculo do operador de polarização em diversos sistemas de grafeno já foi apresentado em artigos diferentes. Por isso, vamos só esboçar a derivação de seus componentes quando necessário.

### Capítulo 3

# Propriedades óticas de uma monocamada de grafeno

Resumindo o que foi dito na seção anterior, podemos concluir que a dinâmica do campo EM na presença de grafeno em aproximação linear pode ser descrita pela seguinte ação efetiva

$$S = -\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^2 + \int d^4x d^4y \delta(x^3) \delta(y^3) A_{\mu}(x) \Pi^{\mu\nu}(y - x) A_{\nu}(y)$$
 (3.1)

Aqui estendemos  $\Pi$  até uma matriz  $4 \times 4$  definindo  $\Pi^{3j} = \Pi^{j3} = 0$ . Variando esta ação em relação ao potencial EM  $A_{\mu}$ , obtemos equações modificadas de Maxwell. Na superfície do grafeno,  $x^3 = 0$ , elas recebem uma contribuição singular

$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu} + \delta(x^3)\Pi^{\nu\rho}A_{\rho} = 0 \tag{3.2}$$

Matematicamente, este potencial de função-delta é equivalente a impor as seguintes condições

$$A_{\mu}|_{x^3=+0} = A_{\mu}|_{x^3=-0},\tag{3.3}$$

$$(\partial_3 A_\mu)|_{x^3 = +0} - (\partial_3 A_\mu)|_{x^3 = -0} = \prod_\mu {}^\nu A_\nu|_{x^3 = 0}. \tag{3.4}$$

no potencial EM na superfície do grafeno. Ao passo que fora do grafeno o potencial deve obedecer as equações livres de Maxwell.

O mesmo termo de função-delta nas equações de Maxwell também pode ser interpretado como uma corrente planar. Em seguida, a condutividade AC, isto é um coeficiente de proporcionalidade entre a corrente  $\mathbf{j}$  e o campo elétrico  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{j}_a = \sigma_{ab}\mathbf{E}_b$ , manifesta-se como

$$\sigma_{ab} = \frac{\Pi_{ab}(\omega)}{i\omega}$$

onde a, b = 1, 2. Esta relação, em que o operador de polarização é considerado independente do momento planar espacial, ou seja descrevendo o caso de incidência normal, pode ser invertida

$$\Pi^{jk}(\omega, \mathbf{p} = 0) = \begin{pmatrix} \pi^0(\omega) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & i\omega \left( \delta^{ab} \sigma_{xx}(\omega) + \epsilon^{ab} \sigma_{xy}(\omega) \right) \end{pmatrix}.$$
(3.5)

Aqui  $\delta^{ab}$  e  $\epsilon^{ab}$  são símbolos bidimensionais de Kronecker e Levi-Civita, respectivamente. Calculando explicitamente os componentes correspondentes de (2.26) encontraremos as duas condutividades AC, diagonal e de Hall — consultar seção 4.2. O componente temporal,  $\pi^0(\omega)$ , vai ser irrelevante em nossas outras considerações.

Nas seções seguintes vamos revelar a conexão entre os componentes do operador de polarização (ou, equivalentemente, a condutividade) com propriedades óticas do grafeno. Consideramos vários casos de propagação de ondas eletromagnéticas e deduzimos os coeficientes de reflexão e transmissão. Os resultados deste capítulo foram usados em todas as publicações [1]–[7].

### 3.1 Propagação de ondas linearmente polarizadas

Vamos começar considerando uma onda plana propagando ao longo do eixo  $z \equiv x^3$  desde  $x^3 = -\infty$  com a polarização inicial paralela a  $x \equiv x^1$ , que está sendo refletida por e transmitida através de uma amostra de grafeno. Em um campo magnético a condutividade de Hall do grafeno  $\sigma_{xy}$  é diferente de zero. Portanto, no caso geral ambas polarizações nos eixos x e y estarão presentes na luz transmitida. Neste caso

$$A = e^{-i\omega t} \begin{cases} \mathbf{e}_x e^{ip_3 z} + (r_{xx} \mathbf{e}_1 + r_{xy} \mathbf{e}_y) e^{-ip_3 z}, & z < 0 \\ (t_{xx} \mathbf{e}_x + t_{xy} \mathbf{e}_y) e^{ip_3 z}, & z > 0 \end{cases}$$
(3.6)

onde  $\mathbf{e}_{x,y}$  são vetores unitários na direção x, y respectivamente. As equações livres de Maxwell fora de z=0 implicam  $p_3=\omega$ . Para tais ondas as condições (3.4) se simplificam,

$$A_a\big|_{z=+0} = A_a\big|_{z=-0} \tag{3.7}$$

$$(\partial_z A_a)_{z=+0} - (\partial_z A_a)_{z=-0} = \alpha \left[ \Phi(k) \delta_a^b + i\omega \phi(k) \epsilon_a^b \right] A_b, \qquad (3.8)$$

onde usamos  $\Pi$  de (2.29), a,b=1,2,  $\epsilon_1^{-2}=-\epsilon_2^{-1}=1.$  Substituindo aqui (3.6) e resolvendo o sistema de equações lineares, podemos encontrar os coeficientes de transmissão e reflexão

$$t_{xx} = \frac{2(\sigma_{xx} + 2)}{(\sigma_{xx} + 2)^2 + \sigma_{xy}^2},$$

$$t_{xy} = \frac{-2\sigma_{xy}}{(\sigma_{xx} + 2)^2 + \sigma_{xy}^2},$$

$$r_{xx} = t_{xx} - 1, \qquad r_{xy} = t_{xy}.$$
(3.9)

onde também levamos em conta que  $\sigma_{xx} = i\alpha\Phi/\omega$ ,  $\sigma_{xy} = \alpha\phi$  como segue a partir da comparação de (3.5) e (2.29).

A amplitude da onda transmitida é apenas a soma das intensidades nas duas polarizações,

$$\tilde{T} = |t_{xx}|^2 + |t_{xy}|^2, \tag{3.10}$$

e pode ser expandida em potências de  $\alpha$  (equivalentemente, em potências de condutividade)

$$\tilde{T} \simeq 1 - \operatorname{Re} \sigma_{xx} + O(\alpha^2),$$
(3.11)

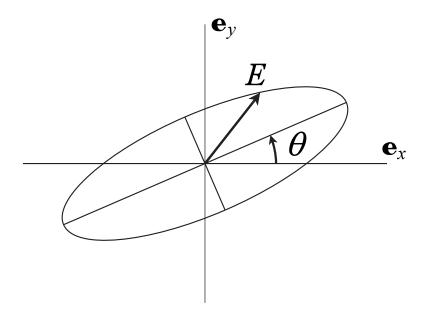


Figura 3.1: Polarização da onda transmitida

Isso significa que há uma absorção no modelo em ordem linear em  $\alpha$ , que está de acordo com o experimento [31, 89]. Em todas as ordens de  $\alpha$  a condição de conservação do fluxo  $|r_{xx}|^2 + |r_{xy}|^2 + |t_{xx}|^2 + |t_{xy}|^2 = 1$  vale, se ambos  $i\sigma_{xx}$  e  $\sigma_{xy}$  forem reais.

Vamos estudar a rotação do eixo de polarização. No caso genérico a onda transmitida tem uma polarização elíptica, ver Fig. 3.1. A relação entre os semieixos da elipse é dada por

$$R = \frac{|s_{+}| - |s_{-}|}{|s_{+}| + |s_{-}|} \simeq -\frac{\operatorname{Im} \sigma_{xy}}{2} + O(\alpha^{2})$$

$$s_{+} = \frac{t_{xx} - it_{xy}}{2}, \qquad s_{-} = \frac{t_{xx} + it_{xy}}{2}$$
(3.12)

enquanto o ângulo com  $\mathbf{e}_x$  é

$$\theta = \frac{1}{2} \arg \frac{s_+}{s_-} = -\frac{1}{2} \arg \frac{\sigma_{xx} + i\sigma_{xy} + 2}{\sigma_{xx} - i\sigma_{xy} + 2} \simeq -\frac{\operatorname{Re}\sigma_{xy}}{2} + O(\alpha^2). \tag{3.13}$$

Notemos ainda que

$$t_{xy} = \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} + 2} t_{xx} \,. \tag{3.14}$$

A onda transmitida é linearmente polarizada se a relação  $t_{xx}/t_{xy}$  é real. Isso acontece exatamente se  $\operatorname{Im} \sigma_{xx} = \operatorname{Im} \sigma_{xy} = 0$ , mas em ordem principal em  $\alpha$  é suficiente requerer  $\operatorname{Im} \sigma_{xy} = 0$ . O ângulo entre o campo elétrico da onda transmitida e  $\mathbf{e}_x$  ainda é dada por (3.13).

Os resultados da seção permitirão uma estimativa aproximada da rotação de Faraday no grafeno que realizamos na seção 4.1

### 3.2 Grafeno sobre um substrato

Uma situação um pouco mais complicada é encontrada investigando a amostra de grafeno sobre um substrato de espessura finita d.

A intensidade da luz medida depois de passar pelo grafeno, substrato e um polarizador rotacionado por um ângulo  $\phi$  em relação ao eixo x é dada por [91]

$$I_{\phi} = \frac{|t_{xx}|^2 + |t_{xy}|^2}{2} + \frac{|t_{xx}|^2 - |t_{xy}|^2}{2} \cos 2\phi - \text{Re}(t_{xx}t_{xy}^*) \sin 2\phi, \tag{3.15}$$

onde  $t_{xx,xy}$  são os coeficientes de transmissão de polarizações nos eixos x e y, respectivamente.

O ângulo em que a expressão (3.15) atinge o seu máximo como uma função de  $\phi$  dá o ângulo  $\theta$  de rotação da polarização

$$\theta = -\frac{1}{2}\arctan\frac{2\text{Re}(t_{xx}t_{xy}^*)}{|t_{xx}|^2 - |t_{xy}|^2},$$
(3.16)

enquanto a transmissão total é dada pela mesma expressão (3.10).

Resolvendo (3.4) com  $\Pi$  definido por (3.5) juntamente com a condição padrão na interface de vácuo com dielétrico em  $z \equiv x^3 = d$ , obtemos

$$t_{xx} = -4n_s e^{id(n_s - 1)\omega} \frac{A_x}{A_x^2 + A_y^2}, \qquad t_{xy} = 4n_s e^{id(n_s - 1)\omega} \frac{A_y}{A_x^2 + A_y^2}$$
(3.17)

onde

$$A_x = (n_s - 1)(n_s - 1 - \sigma_{xx})e^{2id\omega n_s} - (n_s + 1)(n_s + 1 + \sigma_{xx})$$

$$A_y = \sigma_{xy}\left(n_s + 1 + (n_s - 1)e^{2id\omega n_s}\right),$$
(3.18)

 $n_s$  é o índice de refração do substrato (sem absorção).

Tanto o ângulo de rotação da polarização quanto a transmissão oscilam rapidamente com frequência  $\omega$  (ou com a largura do substrato d). Este efeito é chamado de oscilação de Fabry-Perot. No entanto, em muitos casos as oscilações são borradas devido à baixa resolução das medições, ou devido às outras fontes de incoerência. A intensidade média pode ser obtida integrando (3.15) em d sobre o período das oscilações,  $d_p = \frac{\pi}{\omega n_s}$ .

Assim, temos

$$\theta = -\frac{1}{2}\arctan\frac{8\operatorname{Re}(\sigma_{xx}\sigma_{xy}^*) + 4(n_s^2 + 3)\operatorname{Re}\sigma_{xy}}{|2\sigma_{xx} + n_s^2 + 3|^2 - 4|\sigma_{xy}|^2 - (n_s^2 - 1)^2}$$

$$\tilde{T} = \frac{8n_s^2}{|a_+|^2 - |b_+|^2} + \frac{8n_s^2}{|a_-|^2 - |b_-|^2}$$
(3.19)

onde  $a_{\pm} = (n_s + 1)(n_s + 1 + \sigma_{xx} \pm i\sigma_{xy}), b_{\pm} = (n_s - 1)(n_s - 1 - (\sigma_{xx} \pm i\sigma_{xy})), \tilde{T}$  foi primeiro obtido em [40]. Sem o grafeno, a transmissão do substrato puro é

$$T_0 = \frac{2n_s}{1 + n_s^2}. (3.20)$$

Mais tarde devemos usar a transmissão normalizada

$$T = \tilde{T}/T_0, \qquad (3.21)$$

que melhor descreve as características próprias do grafeno.

Para obter as expressões de primeira ordem em  $\alpha$  mantemos apenas os termos lineares na condutividade

$$T \simeq 1 - 2f_s \text{Re}\sigma_{xx}, \qquad \theta \simeq -f_s \text{Re}\sigma_{xy}$$
 (3.22)

onde o coeficiente  $f_s$  lê—se

$$f_s = \frac{n_s^2 + 3}{4n_s^2 + 4}. (3.23)$$

Para reproduzir o caso do grafeno suspenso coloca-se  $n_s = 1$  (i.e.  $f_s = 1/2$ ) para obter

$$T = 4 \frac{|\sigma_{xx} + 2|^2 + |\sigma_{xy}|^2}{|\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2 + 4\sigma_{xx} + 4|^2},$$
  

$$\theta = -\frac{1}{2} \arg \frac{2 + \sigma_{xx} + i\sigma_{xy}}{2 + \sigma_{xx} - i\sigma_{xy}}$$
(3.24)

enquanto em ordem linear na condutividade, as expressões são

$$T \simeq 1 - \text{Re}\sigma_{xx}, \qquad \theta \simeq -\frac{1}{2}\text{Re}\sigma_{xy}.$$
 (3.25)

Ambas expressões coincidem com aquelas obtidas na seção anterior (3.11, 3.13).

Os resultados desta seção serão cruciais para a consideração do efeito Quântico de Faraday no Capítulo 4 e para comparação das previsões do modelo de Dirac com os dados experimentais.

### 3.3 Propagação dos modos de TE e TM

De forma análoga podemos considerar a propagação de outros modos de luz linearmente independentes. Em particular, para o cálculo do efeito de Casimir, no Capítulo 5 precisaremos de modos eletromagnéticos chamados de transversal elétrico (TE) e de transversal magnético (TM) [92]. Em caso de propagação ao longo do eixo z, o modo TE é definido como

$$\mathbf{E} = (-p_2 \mathbf{e}_x + p_1 \mathbf{e}_y) p_0 \Phi(z) \tag{3.26}$$

$$\mathbf{H} = i(p_1\mathbf{e}_x + p_2\mathbf{e}_y)\Phi'(z) + \mathbf{e}_z(p_1^2 + p_2^2)\Phi(z)$$
(3.27)

e o TM como

$$\mathbf{E} = i(p_1 \mathbf{e}_x + p_2 \mathbf{e}_y) \Phi'(z) + \mathbf{e}_z(p_1^2 + p_2^2) \Phi(z)$$
(3.28)

$$\mathbf{H} = (p_2 \mathbf{e}_x - p_1 \mathbf{e}_y) p_0 \Phi(z) \tag{3.29}$$

onde  $\mathbf{e}_{x,y,z}$  são vetores unitários. Um fator global de  $\exp(i(x^0p_0+xp_1+yp_2))$  foi omitido por simplicidade.

Para definir os dados de dispersão nos setores TE e TM, tomamos os potenciais na forma

$$\Phi(x^3) = \begin{cases}
e^{ip_3 z} + r_{\text{TE}} e^{-ip_3 z}, & z < 0 \\
t_{\text{TE}} e^{ip_3 z}, & z > 0
\end{cases}, \qquad \Phi(x^3) = \begin{cases}
e^{ip_3 z} + r_{\text{TM}} e^{-ip_3 z}, & z < 0 \\
t_{\text{TM}} e^{ip_3 z}, & z > 0
\end{cases}$$
(3.30)

Os coeficientes de reflexão e transmissão são definidos pelas condições (3.4) onde manteremos

apenas a parte par do operador de polarização relevante para os cálculos do efeito Casimir. Vamos reescrevê-los em termos dos campos EM E, H.

Em primeiro lugar, podemos constatar que desde que o potencial seja considerado suave na fronteira, podemos reescrever a parte esquerda de (3.4) como

$$[\partial_z A_m] = \mathcal{N} \left[ \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_2 \\ \mathbf{E}_3 \end{pmatrix} \right] \equiv \mathcal{N} [F_H]$$
 (3.31)

onde os colchetes indicam salto da função correspondente sobre a fronteira z=0, e

$$\mathcal{N} = \left( \begin{array}{ccc} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Do lado direito, podemos extrair os componentes de campo da seguinte forma

$$\Pi_m^n A_n = \tilde{\Pi}_{mn} \mathcal{M}^{nl} A_l \tag{3.32}$$

onde  $\mathcal{M}$  é escolhido de tal forma que

$$\mathcal{M}^{nl}A_l = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_1 \\ \mathbf{E}_2 \\ \mathbf{H}_3 \end{pmatrix} \equiv F_E. \tag{3.33}$$

Como estamos interessados em considerar o grafeno em temperatura diferente de zero e na presença do potencial químico, escrevemos o operador de polarização de acordo com a definição (2.32), para obter

$$\tilde{\Pi}_0^{mn} = -\frac{i}{\tilde{p}^2} \begin{pmatrix} p_1 & -p_2 & 0 \\ -p_0 & 0 & v_F^2 p_2 \\ 0 & p_0 & -v_F^2 p_1 \end{pmatrix}, \qquad \tilde{\Pi}_u^{mn} = \frac{iv_F^2}{\tilde{p}^2} \begin{pmatrix} \mathbf{p}^2 p_1 & -\mathbf{p}^2 p_2 & 0 \\ -p_0 p_1^2 & p_0 p_1 p_2 & 0 \\ -p_0 p_1 p_2 & p_0 p_2^2 & 0 \end{pmatrix},$$

enquanto para  $\mathcal{M}$  obtemos

$$\mathcal{M}^{nl} = i \begin{pmatrix} -p_1 & p_0 & 0 \\ -p_2 & 0 & p_0 \\ 0 & -p_2 & p_1 \end{pmatrix}.$$

Assim, finalmente chegamos à condição em termos de campos

$$[F_H] = \mathcal{N}\tilde{\Pi}F_E \tag{3.34}$$

desde que  $\mathcal{N}^2=1$ . Agora substituímos aqui os campos decompostos nos modos TE e TM e com algum trabalho obtemos

$$r_{\text{TE}} = \frac{A}{2ip_3 - A}, \qquad t_{\text{TE}} = \frac{2ip_3}{2ip_3 - A}$$
 (3.35)

$$r_{\rm TM} = -\frac{p_3(A - v_F^2 \mathbf{p}^2 B)}{2i\tilde{p}_3^2 - p_3(A - v_F^2 \mathbf{p}^2 B)}, \qquad t_{\rm TM} = \frac{2i\tilde{p}_3^2}{2i\tilde{p}_3^2 - p_3(A - v_F^2 \mathbf{p}^2 B)}.$$

Para o uso posterior na fórmula de Lifshitz (6.4) para a energia de Casimir, também se pode reescrever os coeficientes de reflexão em termos de componentes do tensor de polarização

$$r_{\rm TM} = \frac{p_3 \Pi_{00}}{p_3 \Pi_{00} + 2i\mathbf{p}^2}, \qquad r_{\rm TE} = -\frac{p_3^2 \Pi_{00} + \mathbf{p}^2 \Pi_{\rm tr}}{p_3^2 \Pi_{00} + \mathbf{p}^2 (\Pi_{\rm tr} - 2ip_3)}.$$
 (3.36)

Ressaltamos que aqui estamos trabalhando com amostras isoladas de grafeno. Caso contrário, o substrato vai contribuir para os coeficientes de reflexão.

### Capítulo 4

## Efeito Faraday Quântico

Neste capítulo aplicamos as previsões do modelo de Dirac à descrição de um experimento recente sobre rotação gigante de Faraday em regime de ressonância cíclotron [42]. Prevemos também outros regimes quando os efeitos são bem pronunciados. A dependência geral da rotação de Faraday e da absorção nos vários parâmetros de amostras é revelada para o grafeno suspenso e epitaxial.

Como foi mostrado no capítulo anterior, as propriedades óticas tanto de grafeno epitaxial quanto do suspenso podem ser expressas através dos componentes do operador de polarização, que codifica todas as informações necessárias das amostras e configuração experimental. Assim, primeiro deveremos calcular o operador de polarização no caso de um campo magnético constante perpendicular ao plano do grafeno, e para amostras de grafeno idealmente limpas e reais. Isso nos permitirá investigar na Seção 4.3 a rotação de Faraday e transmissão de luz, realizando o ajuste dos dados experimentais existentes e prevendo novos regimes.

Os resultados desta seção foram publicadas em [1, 7].

### 4.1 Estimativas gerais

Para estimar a ordem de grandeza dos efeitos de rotação da polarização podemos começar com o caso mais simples de um único férmion massivo em 2+1 dimensões em temperatura nula. A rotação da polarização e a transmissão são dadas por (3.11) e (3.13),

$$\theta \simeq -\frac{\operatorname{Re}\sigma_{xy}}{2} + O(\alpha^2), \qquad T \simeq 1 - \operatorname{Re}\sigma_{xx} + O(\alpha^2).$$

enquanto as condutividades devem ser expressas através de (2.30,2.31) após a identificação  $\sigma_{xx} = i\alpha\Phi/\omega$ ,  $\sigma_{xy} = \alpha\phi$ .

Uma simples análise mostra que ambas  $i\sigma_{xx}$  e  $\sigma_{xy}$  são reais para  $\omega < 2\Delta$  e complexas para  $\omega > 2\Delta$ . Assim, produz-se a absorção, que se inicia em  $\omega = 2\Delta$ . Os efeitos de absorção e de rotação da polarização são suficiente pequenos (para que se possa usar uma expansão em  $\alpha$ ) para todos os valores de  $\omega$ , exceto para uma região estreita em torno de  $\omega = 2\Delta$ . Contudo é provável que efeitos grandes serão mitigados em um modelo mais realista. Em baixas freqüências,  $\omega \ll 2\Delta$ , a função  $\sigma_{xy}$  desaparece e os efeitos de rotação da polarização se tornam insignificantes.

PAra freqüências,  $\omega \gg 2\Delta$ , temos  $\sigma_{xx} \simeq -\alpha\pi/2$  e  $\sigma_{xy} \simeq -\alpha$ . Levando em conta o número

real de espécies de férmions utilizados para a descrição correta das quase partículas do grafeno, consulte [43], vemos que a espressão (3.11) no regime de alta frequência é de perfeito acordo com os resultados experimentais [31, 89]. Por outro lado, o ângulo de rotação neste limite é  $\theta \simeq \alpha/2$  que está bem acima do limite de sensibilidade de modernos dispositivos óticos. Fenomenologicamente os valores aceitáveis do parâmetro de massa (intervalo de energia, potencial químico, etc.) para muitos sistemas reais é no máximo da ordem de 0.1eV. Portanto, se existe uma parte de paridade ímpar da ação efetiva, os efeitos de rotação da polarização devem ser bem detetáveis já na parte visível do espectro.

Em quais condições poderiam os efeitos descritos acima se realizar? Uma possibilidade bastante especulativa é que os termos ímpares possam aparecer sem um campo magnético externo. Tal possibilidade foi já estudada no artigo pioneiro por Haldane [20]. Note que mesmo um não-cancelamento de partes ímpares relativamente minúsculo entre as espécies diferentes de férmions, tão pequeno quanto 10% de (2.31), já deve ser detectável com técnicas experimentais dos dias de hoje. Além disso, existem sistemas bidimensionais sem simetria de reflexão, como os filmes de algumas camadas de grafeno [93], onde não há nenhum motivo particularmente bom para esperar este cancelamento.

No entanto, o mais natural é pensar em um sistema de paridade par clássico no campo magnético externo. Neste caso, a presença do termo de Chern-Simons e, consequentemente, de rotação da polarização parece ser inevitável. Na verdade, a ação efetiva para férmions no grafeno na presença de um campo magnético constante com certeza contém um termo de Chern-Simons para este campo [105]. Por outro lado, os cálculos diretos do operador de polarização no campo magnético externo (feito em [43] para o caso da parte espacial do momento externo nula) mostra explicitamente a contribuição de Chern-Simons (compare com a parte direita de (3.8) efetivamente definindo a condutividade em nosso modelo com (A4), (A8) of [43]). A rotação da polarização devido a efeitos quânticos no campo magnético externo é uma espécie de efeito Faraday quântico. Este efeito no regime de ressonância cíclotron foi recentemente medido em [42].

Nas seções a seguir, realizamos os cálculos necessários do operador de polarização para incluir o campo magnético, comparamos com o resultado experimental e prevemos novos resultados.

### 4.2 Cálculo do operador de polarização

As peculiaridades das amostras de grafeno em questão são codificadas no operador de polarização através da função de Green de férmions. Em um campo magnético constante B perpendicular à superfície do grafeno este tem a forma [43, 94]

$$S(\omega, \mathbf{p}) = e^{-\mathbf{p}^2/|eB|} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{S_n(\omega + \mu, \mathbf{p})}{(\omega + \mu)^2 - M_n^2},$$
(4.1)

onde

$$S_n(\omega, \mathbf{p}) = 2(\omega \gamma^0 + \Delta) \left[ P_- L_n \left( \frac{2\mathbf{p}^2}{|eB|} \right) - P_+ L_{n-1} \left( \frac{2\mathbf{p}^2}{|eB|} \right) \right] - 4v_F \mathbf{p} \cdot \gamma L_{n-1}^{(1)} \left( \frac{2\mathbf{p}^2}{|eB|} \right) . \tag{4.2}$$

Aqui  $P_{\pm} = (1 \pm i\gamma^1\gamma^2\epsilon_B)/2$ ,  $\epsilon_B \equiv \text{sign}(B)$ , os níveis de Landau são  $M_n = \sqrt{2nv_F^2|eB| + \Delta^2}$ , e  $L_n^{(\alpha)}$  são os polinômios associados de Laguerre,  $L_n \equiv L_n^{(0)}$ ,  $L_{-1}^{(\alpha)} = 0$ .  $\mu$  denota o desnível de energia de Fermi (ou o potencial químico na terminologia de TQC).

Para descrever a presença de impurezas, introduzimos um parâmetro fenomenológico  $\Gamma$  por meio da substituição

$$\omega \to \omega + i\Gamma \operatorname{sgn}\omega, \quad \Gamma > 0.$$

em todos os lugares de (4.1). No limite de  $\Gamma \to 0$  recupera-se o propagador de Feynman usual. Para  $\Gamma \neq 0$  o propagador  $\mathcal{S}$  não é uma função analítica de  $\omega$  devido à presença de  $\operatorname{sgn} \omega$ . De modo geral,  $\Gamma$  pode ser dependente da freqüência, campo magnético, etc. Vamos nos restringir a um  $\Gamma$  constante, que é suficiente em um campo magnético não muito forte [95], mas veja também [96].

Estamos prontos para substituir (4.1) na Eq. (2.26). Como devemos considerar apenas as ondas de incidência normal,  $\mathbf{p}=0$  (2.26), a integral sobre o momento espacial  $\mathbf{q}$  pode ser facilmente executado com a ajuda da condição de ortogonalidade dos polinômios de Laguerre

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x) dx = \frac{(n+\alpha)!}{n!} \delta_{n,m}. \tag{4.3}$$

Após um pouco de álgebra, chegamos à seguinte expressão para a condutividade de Hall

$$\sigma_{xy}(p_0) \equiv \frac{\Pi_{12}}{ip_0} = \frac{\epsilon_B \alpha N L_b^2}{p_0} \sum_{n=0}^{\infty} G_n \tag{4.4}$$

onde  $L_b^2 = 2v_F^2 |eB|$ ,  $G_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left( f_{n,n+1} - f_{n+1,n} \right)$  e  $f_{nm}$  é dada por

$$f_{nm} = \frac{i}{2\pi} \frac{(\tilde{\omega} + i\Gamma \operatorname{sgn}\omega)(p_0 - \tilde{\omega} - i\Gamma \operatorname{sgn}(\omega - p_0)) + \Delta^2}{(\tilde{\omega} + i\Gamma \operatorname{sgn}\omega)^2 - M_n^2)(\tilde{\omega} - p_0 + i\Gamma \operatorname{sgn}(\omega - p_0))^2 - M_m^2)}$$
(4.5)

Aqui  $\tilde{\omega} \equiv \omega + \mu$ . Para a condutividade diagonal, temos analogamente

$$\sigma_{xx}(p_0) = \frac{i\alpha N L_b^2}{p_0} \sum_{n=0}^{\infty} H_n \tag{4.6}$$

onde  $H_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (f_{n,n+1} + f_{n+1,n}).$ 

Como já mencionamos, o operador de polarização  $\Pi_{jk}$  tem sido considerado em uma série de artigos para sistemas caracterizados por vários conjuntos de parâmetros. No caso de temperatura nula ele foi calculado pela primeira vez em [84]. Em temperatura finita cálculos foram feitos em [97], enquanto alguns outros casos foram considerados, por exemplo, em [46, 98]. Na presença de um campo magnético externo cálculos extensivos do operador de polarização foram feitos pelo grupo de Kiev e colaboradores dele [25, 43, 47, 45, 46]. As expressões mais próximas para o caso considerado aqui podem ser encontradas em [48].

#### 4.2.1 EHQ no grafeno limpo

Os cálculos esboçados acima são relativamente padrão, mas diferem em detalhes de outras fontes. Como uma verificação de consistência reproduzimos nesta subseção, o Efeito Hall Quântico no grafeno.

Para o grafeno limpo,  $\Gamma \to +0$ , o cálculo da integral sobre a frequência em (4.4) pode ser realizado com a ajuda do teorema de Cauchy resultando

$$\sigma_{xy}(p_0) = -\epsilon_B \alpha N L_b^2 \frac{p_0^2 - M_{n_0}^2 - M_{n_0+1}^2 + 2\Delta^2}{(p_0^2 + M_{n_0+1}^2 - M_{n_0}^2)^2 - 4p_0^2 M_{n_0+1}^2}$$
(4.7)

onde  $n_0$  é definido de tal forma que  $M_{n_0} < \mu$ , enquanto  $M_{n_0+1} > \mu$ , ou seja,

$$n_0 = \left| \frac{\mu^2 - \Delta^2}{2v_F^2 |eB|} \right| \tag{4.8}$$

aqui  $\lfloor x \rfloor$  denota a parte inteira de x, com  $\lfloor x \rfloor = 0$  para x < 0. Como esperado, (4.7) coincide com os resultados anteriores e, por exemplo, com o limite  $T \to 0$  de Eq. (12) em Ref. [47].

No limite de corrente constante (DC),  $p_0 \rightarrow 0$ , tem-se

$$\sigma_{xy}^{dc} = \lim_{p_0 \to 0} \sigma_{xy} = \alpha \epsilon_B N \left( 1 + 2n_0 \right). \tag{4.9}$$

Novamente temos coincidencia com os resultados de outros cálculos de condutividade de Hall relativística [29, 43, 99, 100, 101]. A lei (4.9), que é chamada de Efeito Hall Quântico anômalo, ou efeito Hall inteiro não—convencional, foi verificada em experimentos [26, 27]. Esta é uma das mais espetaculares confirmações do modelo de Dirac de quase—partículas no grafeno. Note que este resultado vale para qualquer valor de massa.

No limite oposto,  $p_0 \to \infty$ , (ou seja, para a luz visível), obtemos

$$\sigma_{xy} \approx -\frac{\epsilon_B \alpha N L_b^2}{p_0^2}. (4.10)$$

#### 4.2.2 Impacto de impurezas

Em amostras reais as impurezas estão sempre presentes, de modo que deve-se manter  $\Gamma$  positivo. Neste caso, a função de Green de férmions,  $\mathcal{S}$ , não é uma função analítica de  $\omega$ , e não podemos aplicar o teorema dos resíduos para integração em  $\omega$  em (4.4) e (4.6). Ainda assim, essa integral ou n-soma pode ser resolvida explicitamente, e é uma questão de conveniência de qual operação executar primeiro. Para a análise da dependência de condutividade na frequência achamos mais adequado integrar primeiro sobre  $\omega$ .

Depois de alguma álgebra elementar, porém complicada, a integral da parte não-diagonal resulta

$$G_n = \frac{i}{8\pi} \sum_{\epsilon, \epsilon' = \pm} \left( \frac{g_1(\epsilon M_n, \epsilon' M_{n+1})}{p_0 - (\epsilon M_n + \epsilon' M_{n+1})} + \frac{g_2(\epsilon M_n, \epsilon' M_{n+1})}{p_0 + 2i\Gamma - (\epsilon M_n + \epsilon' M_{n+1})} \right) - (\mu \to -\mu), \quad (4.11)$$

$$g_1 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{M_{n+1}M_n}\right) \log \frac{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_{n+1})(i\Gamma + \mu + M_{n+1})}{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_n)(i\Gamma + \mu + M_n)}, \tag{4.12}$$

$$g_2 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{M_{n+1}M_n}\right) \log \frac{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_n)(i\Gamma + \mu - M_{n+1})}{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_{n+1})(i\Gamma + \mu - M_n)}.$$
 (4.13)

O limite  $\Gamma \to 0$  tomado na expressão acima restaura (4.7).

Na parte diagonal de condutividade, obtemos um resultado semelhante

$$H_{n} = \frac{i}{8\pi} \sum_{\epsilon \epsilon' = +} \left( \frac{h_{1}(\epsilon M_{n}, \epsilon' M_{n+1})}{p_{0} - (\epsilon M_{n} + \epsilon' M_{n+1})} + \frac{h_{2}(\epsilon M_{n}, \epsilon' M_{n+1})}{p_{0} + 2i\Gamma - (\epsilon M_{n} + \epsilon' M_{n+1})} \right) + (\mu \to -\mu), \quad (4.14)$$

$$h_1 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{M_{n+1}M_n}\right) \log \frac{(i\Gamma + \mu + M_n)(i\Gamma + \mu + M_{n+1})}{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_n)(p_0 + i\Gamma + \mu - M_{n+1})},$$
(4.15)

$$h_2 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{M_{n+1}M_n}\right) \log \frac{(p_0 + i\Gamma + \mu - M_n)(p_0 + i\Gamma + \mu - M_{n+1})}{(i\Gamma + \mu - M_n)(i\Gamma + \mu - M_{n+1})}.$$
 (4.16)

É evidente a partir de (4.11) e (4.14), que a parte não—diagonal da condutividade é ímpar no potencial químico, enquanto a parte diagonal é par.

#### 4.2.3 Renormalização

Pela contagem de potências do momento, o operador de polarização (2.26) parece conter uma divergencia ultravioleta. Na verdade, isso surge na parte diagonal (4.6) onde a soma infinita de  $h_n$  em n não converge pois eles não decaem suficiente rápido em m, i.e.,

$$H_n \underset{n \to \infty}{\simeq} -\frac{1}{2M_n} + O(n^{-3/2}).$$
 (4.17)

Como podemos ver, a divergência é na parte imaginária de  $\sigma_{xx}$ , enquanto em ordem  $\alpha^1$  temos  $1-T\sim \mathrm{Re}\sigma_{xx}$  (3.22). Assim, se alguém está interessado somente no nível  $\alpha^1$  o procedimento de renormalização não é necessário. No caso geral este problema pode ser resolvido, por exemplo, através da subtração de Pauli-Villars em massa infinita.

Proseguindo assim, considera-se uma diferença entre duas expressões de operadore de polarização (2.26) obtidas tomando massas diferentes  $\Delta$ ,  $\tilde{\Delta}$ , onde o último deve ser levado para o infinito após a integração sobre o momento de loop. Em (4.6) isso resulta na substituição de  $H_n(\Delta)$  por  $H_n(\tilde{\Delta}) - H_n(\tilde{\Delta})$ . Para calcular as assintóticas de tal  $\sigma_{xx}$  em  $\tilde{\Delta} \to \infty$  acrescenta-se e subtrai-se (4.17) sob a soma em n, e, em seguida, aplica-se a fórmula de Abel-Plana para expressar as somas através de integrais, realiza-se a expansão para grandes  $\tilde{\Delta}$ , e depois toma-se o limite. A condutividade diagonal renormalizada obtida deste modo se lê

$$\sigma_{xx}^{R} = \frac{\alpha i N L_{b}^{2}}{p_{0}} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \left( H_{n} + \frac{1}{2M_{n}} \right) + \frac{\Delta}{L_{b}^{2}} - \frac{1}{4\Delta} - \frac{2\Gamma}{\pi L_{b}^{2}} - \frac{i}{2} \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{e^{2\pi x} - 1} \left( \frac{1}{M(ix)} - \frac{1}{M(-ix)} \right) \right), \tag{4.18}$$

onde  $M(z)=+\sqrt{zL_b^2+\Delta^2}$ . Na seção 4.3.1 usaremos essa expressão para ambos massa finita e limite  $\Delta\to 0$ . O ultimo é consistente com o uso de regularização de Pauli-Vilars desde que em 2+1 dimensões não exista nenhuma divergência logarítmica, ao contrário do caso em 3+1 dimensões.

Para  $\mu$ ,  $\Delta$  and B nulos, o diagrama de um loop em (3.1) é finito, consulte [22]. No nosso caso este diagrama é divergente, pois temos bem menos simetrias. Gostaríamos de mencionar, que tem de se tomar cuidado com os diagramas divergentes por contagem de potências que são na verdade finitos por motivos de simetria. Às vezes, esses diagramas, no entanto, requerem uma

renormalização finita. Por exemplo, este efeito dá origem à anomalia de paridade [86, 102] em 2 + 1-dimensões.

### 4.3 Fenomenologia

As fórmulas para a condutividade do grafeno dadas acima, juntamente com os resultados da Seção 3.2 podem ser usadas agora para investigar as propriedades óticas das amostras reais de grafeno, incluindo aquelas sobre um substrato. Em particular, na próxima subseção, mostraremos que o modelo de Dirac ajusta muito bem os resultados das medidas experimentais das propriedades magneto-óticas de grafeno epitaxial [42].

Embora os efeitos da rotação de polarização e da absorção sejam muito fortes para um material de espessura monoatômica, eles são ainda suficiente pequenos para permitir uma descrição qualitativa por ordem- $\alpha^1$  da teoria de perturbação. É suficiente utilizar (3.22) e (4.4,4.6) para estimar a ordem de magnitude do efeito para a transmissão e o ângulo de rotação

$$T = 1 + 2f_s \frac{\alpha N L_b^2}{p_0} \operatorname{Im} \sum_{n=0}^{\infty} H_n,$$

$$\theta = -f_s \frac{\epsilon_B \alpha N L_b^2}{p_0} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} G_n.$$
(4.19)

Ainda assim, para a comparação numérica com os resultados do experimento as fórmulas exatas (3.19) têm de ser aplicadas, como discutido na subseção seguinte.

Para distinguir os diferentes regimes físicos, vamos começar investigando o comportamento analítico dos T e  $\theta$ , ou seja  $G_n$  e  $H_n$ . Ao contrário de sua aparência, nem  $G_n$  nem  $H_n$ , como funções de freqüência  $p_0$ , tem realmente qualquer pólo no plano complexo. Na verdade, se formos considerar, por exemplo, a função  $g_2(p_0, -M_n, M_{n+1})$  (4.12) nas proximidades de  $p_0 = M_{n+1} - M_n - 2i\Gamma$  dá para ver que ela desaparece lá e assim anula o denominador correspondente. Da mesma forma ela comporta—se em todos outros pontos  $\epsilon M_n + \epsilon' M_{n+1}$ , etc.

Por outro lado, no grafeno limpo a condutividade Hall (4.7) (e, portanto, o ângulo de rotação de polarização) tem pólos em

$$p_0 = \pm (M_{n_0+1} \pm M_{n_0}). \tag{4.20}$$

Naturalmente esperaria—se que o comportamento da condutividade em amostras reais com  $\Gamma$  suficiente pequeno seja bastante semelhante ao caso limpo. Assim, no que se segue vamos concentrar nesses pontos e investigar as propriedades óticas em sua vizinhança.

Dois regimes físicos principais já podem ser distinguidos considerando (4.20). Para grande potencial químico,  $\mu \to \infty$ , o sistema entra no regime chamado de ressonância cíclotron, que é característico para grafeno epitaxial no campo magnético. O outro limite,  $\mu \to 0$ , representa amostras suspensas de grafeno sem tensão de porta aplicada. As freqüências (positivas) (4.20) nestes casos são

$$p_0 \underset{\mu \to \infty}{\simeq} \frac{L_b^2}{2\mu}, \qquad p_0 \underset{\mu \to \infty}{\simeq} 2\mu, \qquad p_0 \underset{\mu \to 0}{\simeq} M_1.$$
 (4.21)

No que segue consideramos estes dois regimes em mais detalhes para estimar corretamente a magnitude dos efeitos, e especificar a posição de seu maximo.

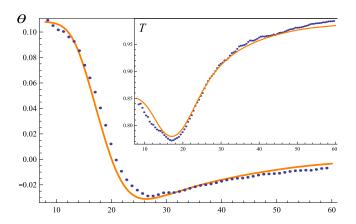


Figura 4.1: Os dados experimentais (linhas pontilhadas) e as curvas do melhor ajuste (linhas contínuas,  $\mu = 289.2 \text{meV}$ ,  $\Gamma = 4.4 \text{meV}$ ) para a rotação de Faraday e a transmissão relativa (inserção) ao  $\mathbf{B} = 7 \text{T}$ , como funções de  $p_0[\text{meV}]$ .

### 4.3.1 Grafeno epitaxial, potencial químico grande

O grafeno epitaxial é caracterizado pelo considerável desnível de energia de Fermi devido à interação com os átomos do substrato. Em conhecidos dispositivos experimentais, o potencial é da ordem de décimos de eV,  $\mu \equiv \epsilon_F \sim 0.1-0.5$  eV [40, 42, 103]. Se uma tensão de porta é aplicada o potencial químico pode ser aumentado ainda mais. Outros parâmetros do sistema, tais como a taxa de espalhamento ou a distância entre os níveis vizinhos de Landau (aos campos magnéticos de alguns Teslas) são da ordem de 1-10 meV, ou menor. Assim, o potencial químico dá a maior escala, e o sistema está em regime de ressonância cíclotron.

As medições experimentais da rotação de Faraday e da transmissão neste regime foram relatadas recentemente em [42]. Em seu set—up, os autores utilizaram mono e multicamadas de grafeno sobre um substrato de SiC sujeito a um campo magnético variando de 0.5 T a 7 T. É o objetivo desta subseção mostrar que o modelo de Dirac ajusta perfeitamente as curvas experimentais para as monocamadas. No que se segue focamos no ângulo de rotação de Faraday, mas considerações semelhantes podem ser dadas para a transmissão.

Entre os dois pontos indicados em (4.21) para potencial químico grande, vamos considerar apenas o primeiro, desde que o segundo,  $p_0 \simeq 2\mu$ , corresponda às frequências demais elevadas. Qualitativamente, o comportamento do ângulo da rotação de Faraday no ultimo ponto é semelhante ao comportamento no primeiro que é representado na Fig. 4.3.

Antes de realizar o ajuste numérico, primeiro notamos que a contribuição principal para a soma infinita em (4.19) vem de uma vizinhança pequena de  $n=n_0(\mu)$ , (4.8). Isso segue da investigação analítica de  $\mathrm{Re}G_n$ , que também mostra que, para  $\mu$  suficiente grande, cerca de  $\mu>\frac{M_1^2}{2\pi\Gamma}$ , cada contribuição à soma tem o máximo em  $p_0=0$ 

$$\operatorname{Re} \frac{\partial (G_n/p_0)}{\partial p_0} \bigg|_{p_0=0} = 0.$$

O valor máximo,  $\text{Re}G_n(p_0 = 0)$ , em função de n para o potencial químico fixo, é nitidamente pontudo em torno de  $n = n_0$ , cuja localização é governada pela diferença de dois arcotangentes ligeiramente deslocados.

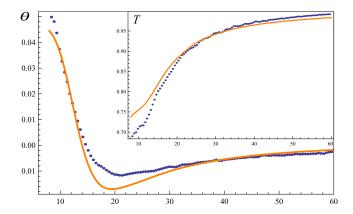


Figura 4.2: As previsões teóricas (linhas sólidas) de rotação de Faraday e da transmissão (inserção) plotados em função da freqüência  $p_0[\text{meV}]$  a B= 2T para  $\mu=120\text{meV}$ ,  $\Gamma=3.9\text{meV}$ ,  $\Delta=110\text{meV}$ . Curvas experimentais correspondentes são dadas em linhas pontilhadas.

Assim, para comparação com as observações podemos substituir o somatório infinito em (4.4,4.6) por uma soma finita. Para os dados experimentais de [42], provou-se ser suficiente escolher o intervalo do somatório de 0 até  $n_0 + 30$ . Uma estimativa aproximada da amplitude do efeito pode ser dada pela contribuição principal de  $n = n_0$ ,

$$\theta_{max} \equiv -f_s \frac{\epsilon_B \alpha N L_b^2}{p_0} \text{Re} G_{n_0} \bigg|_{p_0 = 0} \sim \frac{0.75 f_s \alpha L_b^2}{(M_{n_0 + 1} - M_{n_0})^2} \sim \frac{3 f_s \alpha \mu^2}{L_b^2}, \tag{4.22}$$

que está em um acordo razoável com cálculos numéricos exatos bem como com os resultados experimentais, desde que colocamos  $f_s \simeq 0.31$  de acordo com [42].

Apesar de que as fórmulas aproximadas (4.19) dão uma estimativa correta do magnitude do efeito observado, para realizar ajuste dos dados experimentais devemos usar as fórmulas exatas (3.19). Para os cálculos numéricos utilizou-se o pacote de software Origin 8.6 desenvolvido pela OriginLab.

Os resultados do ajuste, que foi realizado simultaneamente para a rotação de polarização e para a transmissão relativa (como definida por (3.21)), estão resumidos a seguir:

- As curvas experimentais para a rotação e a transmissão estão bem ajustadas pelo modelo de Dirac para campos maiores que 2T. O ajuste é explificado na Fig. 4.1 onde ambas as curvas experimentais (linhas pontilhadas) e teóricas (as sólidas) são apresentadas.
- Para esses campos o valor do melhor ajuste do potencial químico  $\mu$  encontra-se em cerca de 280 290 meV, então um pouco menor do que o desnível da energia de Fermi medida no campo magnético nulo,  $\epsilon_F = 340$ meV. Ele não mostra qualquer dependência específica no campo magnetico.
- O ajuste se torna significativamente pior para campos magnéticos menores que 2T. No entanto, ele pode ser melhorado por diminuindo o potencial químico (até cerca de 100 120meV) e introduzindo uma massa não-nula Δ, veja Fig. 4.2.

Nós não realizamos uma análise estatística dos dados e não calculamos a precisão de determinação dos parâmetros  $\mu$ ,  $\Gamma$  e  $\Delta$ . No entanto, algumas observações mais qualitativas estão em

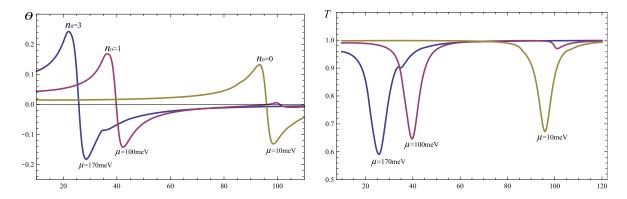


Figura 4.3:  $\theta$  e T em função da freqüência  $p_0[\text{meV}]$  para potenciais químicos diferentes, para  $\mathbf{B} = 7\mathrm{T}$ ,  $\Gamma = 1\mathrm{meV}$ ,  $\Delta = 0$ .

ordem.

O experimento foi conduzido à temperatura de 5K e concluímos que a condutividade à temperatura nula considerada acima é suficiente para descrever os dados observados. A dependência de valor do melhor ajuste de  $\Gamma$  no campo magnético foi encontrada em cerca de  $\pm 10\%$ , e nós não fomos capazes de resolvê-lo com mais precisão devido às limitações dos dados experimentais. Nossos cálculos mostraram uma minuscula dependência na massa  $\Delta$ , desde que ela seja muito menor do que potencial químico  $\mu$ . Por outro lado, uma massa perto do valor do potencial químico altera as curvas de forma significativa, como na Fig. 4.2. No entanto, não se deve considerar este procedimento de ajuste como um indício forte da geração da massa nas amostras medidas de grafeno. É algo que exige uma investigação mais detalhada dos fenômenos em campos baixos. Assim, existe agora uma pesquisa constante [91] fortemente indicando que a forma espectral da rotação de Faraday e da transmissão pode ser afetada por efeitos magneto—plasmónicos que são de maior importância para campos mais fracos.

No trabalho original [42], o experimento foi ajustado utilizando uma aproximação linear em condutividade descrita pelo modelo de Drude. Verificou-se ali que a dependência da freqüência cíclotron no campo magnético não está em acordo com a previsão teórica (4.21),  $\omega_c \approx L_1/2\mu$ , primeira obtida em [45]. Acima de tudo, isso também implica que o potencial químico está crescendo com o campo magnético a partir de  $\mu \approx 188$ meV para B=1T até  $\mu \approx 265$ meV para B=7T. Nós não encontramos potencial químico crescente no nosso ajuste, e atribuímos esta discrepância com os nossos resultados pelo uso da fórmula de Drude em [42] onde nenhuma dependência do peso de Drude nos outros parâmetros do sistema foi assumida.

Além desta 'anomalia de frequência ciclotron', encontrou—se que o modelo de Drude descreve muito bem os resultados do experimento. Ainda assim, o comportamento Drude do modelo de Dirac não pode ser uniformemente estendido para freqüências mais altas, uma vez que ele não prevê quaisquer pólos na condutividade no plano complexo, mostrando um comportamento muito mais complicado.

#### 4.3.2 Grafeno suspenso: Potencial químico moderado e pequeno

Continuamos investigando a rotação de Faraday como uma função da frequência para potenciais químicos moderados e pequenos. O primeiro caso pode ser aplicável para a descrição do grafeno

epitaxial com a tensão de porta aplicada, enquanto os potenciais pequenos são relevantes para as amostras suspensas ou para as camadas de grafeno dissociadas [104].

De forma semelhante ao caso de  $\mu$  grande podemos mostrar que para o potencial químico pequeno ou moderado a maior contribuição para a soma (4.19) nas proximidades do (4.20) vem do termo  $n_0$ . No entanto, neste caso, o extremo da parte real de  $G_{n_0}/p_0$  fica em  $p_0 \sim (M_{n_0+1}-M_{n_0}) \pm \Gamma$ , onde

$$\operatorname{Re}G_{n_0} \simeq \pm \frac{0.06}{\Gamma} \left( 1 - \frac{\Delta^2}{M_{n_0+1} M_{n_0}} \right),$$
 (4.23)

aqui assumimos que  $\Gamma \ll M_{n_0+1} - M_{n_0}$ . Para uma massa pequena este valor é quase independente do número do nível de Landau, e assim o máximo do ângulo de rotação é inversamente proporcional à diferença entre os níveis de Landau correspondentes

$$\theta_{max}(\Delta = 0) \sim \frac{0.24 f_s \alpha}{\Gamma} \frac{L_b (1 + \delta_{0n_0})}{\sqrt{n_0 + 1} - \sqrt{n_0}}.$$
 (4.24)

Para  $\Delta = 0$  também temos  $M_0 = 0$ , e assim os dois pontos,  $p_0 = M_1 + M_0$  e  $p_0 = M_1 - M_0$  coincidem. Consequentemente, tem-se duas contribuições idênticas para  $n_0 = 0$ , que é levado em conta por  $\delta_{0n_0}$  na fórmula acima.

A expressão (4.24) dá uma estimativa aproximada da rotação de Faraday em nível de  $\alpha^1$ . Para descrever o efeito em amostras bem limpas (como, por exemplo, aquelas descritas em [104] onde  $\Gamma \sim 3 \cdot 10^{-2} \text{meV}$ ) tem—se de usar a expressão completa (3.24) para corretamente levar em conta os termos  $O(\alpha/\Gamma)$ .

Para o grafeno suspenso usamos a expressão (3.24) para traçar na Fig. 4.3 a rotação de Faraday e o espectro da transmissão em função da freqüência para  $\mathbf{B}=7\mathrm{T}$  e  $\Gamma=1\mathrm{meV}$  para três valores diferentes do potencial químico. O valor máximo do ângulo da rotação para tais parâmetros tem a ordem de grandeza prevista pela (4.24), no entanto, os mínimos em espectro de transmissão calculado através (3.24) são pelo menos duas vezes mais rasos do que previstos por (3.22). Ainda assim, ambos os efeitos, neste caso, são muito grandes para um material de espessura monoátomica.

Finalmente, pode-se considerar o ângulo da rotação (3.22) como uma função do potencial químico para uma frequência fixa. Naturalmente esperaramos que para um  $\Gamma$  pequeno, o comportamento do ângulo deve ser semelhante ào do caso ideal. Uma análise numérica mostra que ele é quantizado da mesma maneira como a condutividade Hall definida por (4.7). Na imagem de esquerda da Fig. 4.4 plotamos o ângulo com a freqüência fixa próximo a  $M_1$ . Assim, para  $\mu < M_1$  o efeito fica reforçado em acordo com (4.24). Na figura à direita a frequência está longe de qualquer valor especial, e assim a amplitude total é muito menor.

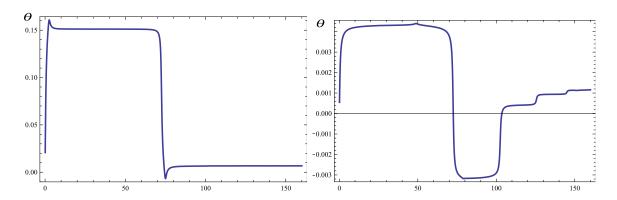


Figura 4.4:  $\theta$  em função do potencial químico  $\mu[\text{meV}]$ , com  $\mathbf{B}=4\text{T}$ ,  $\Gamma=0.5\text{meV}$  para  $p_0=75\text{meV}$  (esquerda), and  $p_0=151\text{meV}$  (direita).

## Capítulo 5

# Efeito Casimir à temperatura nula

Como é explicado na Introdução, as forças de Casimir (e as de van der Waals), podem ter um papel significativo em distâncias características de dispositivos em nanoescala. Como o grafeno deverá desempenhar um papel essencial neles, nós vamos investigar nos próximos capítulos os diferentes aspectos da interação de Casimir envolvendo as amostras do grafeno.

Começaremos considerando a força de Casimir entre o grafeno e o condutor ideal, ambos considerados em temperatura nula, em que o primeiro é descrito no âmbito do modelo de Dirac. Como é mencionado na Introdução, esta configuração já foi considerada em [65, 66, 67] utilizando um modelo hidrodinâmico [68, 69] para os elétrons no grafeno. Embora esse modelo tenha sido provado não aplicável para o grafeno, ele funciona bem para alguns outros materiais, e vamos usá-lo como um ponto de referência teórica para comparar os nossos resultados.

Assumimos que a camada do grafeno está em  $x_3 = 0$ , enquanto o condutor paralelo está localizado em  $x_3 = a$ .

Os resultados desta seção foram publicados em [2, 4].

### 5.1 Abordagem perturbativa de EDQ

Um dos jeitos possíveis de se calcular a energia de Casimir no sistema em questão é avaliar a ação efetiva  $W=i\log Z$  na Teoria Quântica de Campos descrita por função de partição Z (2.22), assumindo que  $A_{\mu}$  satisfaz (2.21). Uma vez que o fundo é estático (as posições das superfícies

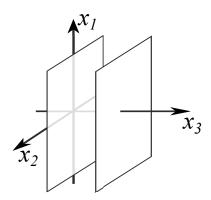


Figura 5.1: A configuração de Casimir.

não dependem do tempo), a densidade da energia por unidade de área das superfícies é

$$\mathcal{E} = -W/(TS),$$

em que devido à invariância de translação, temos que dividir a ação efetiva pelo intervalo de tempo (introduzido temporariamente) T e a área da superfície S. Como consequência de (2.22) e (2.25) em ordem principal na constante de estrutura fina  $\alpha$  temos

$$\mathcal{E}_1 = -\frac{1}{TS} (5.1)$$

onde a linha sólida indica o propagador fermiônico em 2+1 dimensões (ou seja, dentro da amostra do grafeno), e a linha ondulada é o propagador dos fótons no espaço 3+1 dimensional sujeito às condições de fronteira do condutor perfeito (2.21). Podemos usar o calibre de Feynman que gartante a não aparecemento de fantasmas.

O cálculo da (5.1) é bastante semelhante ao cálculo das correções radiativas para a energia de Casimir em [106]–[109]. A diferença importante é que naqueles trabalhos consideraram—se os férmions propagando no espaço ambiente como uma correção para a força de Casimir entre dois condutores perfeitos. Nesse caso, o diagrama (5.1) representa apenas a correção  $O(\alpha)$  para a energia de Casimir. No nosso caso, o diagrama (5.1), ainda é de ordem  $O(\alpha)$ , representa o efeito de ordem principal.

Para calcular o diagrama (5.1) só precisamos acoplar o kernel (2.29) com o propagador dos fótons e integrar sobre o impulso do fóton. Simbolicamente, no nível  $O(\alpha)$  temos

$$W \simeq \frac{i}{2} \text{Tr}(\Pi D),$$

onde Tr é o traço funcional,  $\Pi$  é o operador de polarização considerado em Sec. 2.2.2 e D é a propagador de fótons. Na calibre de Feynman o propagador  $D_{\mu\nu}$  é diagonal. Uma vez que  $\Pi^{ij}$  por construção não tem componentes ao longo da direção  $x^3$ , estamos interessados apenas na parte  $D_{ij}$  do propagador. De acordo com (2.21), esses componentes satisfazem às condições de contorno de Dirichlet, e podemos escrever

$$D_{ij}(x;y) = g_{ij}(D_0(x-y) - D_0(x-y_R)), \quad i,j = 0,1,2$$
(5.2)

onde

$$D_0(x) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{e^{ipx}}{p^{\mu}p_{\mu}}$$

é o propagador padrão (de Feynman) de um campo escalar livre sem massa em 3+1 dimensões, e a coordenada  $y_R$  é refletida na superfície do condutor,  $y_R^3 = 2a - y^3$ . A ação efetiva completa, assim, lê-se

$$W = \frac{i}{2} \int d^3x \, d^3y \, \Pi_j^j(x,y) [D_0(x-y,0) - D_0(x-y,2a)], \qquad (5.3)$$

onde ambos x e y estão na superfície do grafeno. Depois de fazer a transformação de Fourier nas

direções paralelas às superfícies, podemos escrever  $D_0$  como

$$D_0(x,y) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{ip_j(x^j - y^j)} D(p, x^3 - y^3).$$
 (5.4)

Para os momentos Euclidianos, ou seja, após a rotação de Wick  $p \to p_E = (p_4, p_1, p_2), p_4 = ip_0$ , a sua forma explícita lê—se

$$D(p_E, x^3 - y^3) = \frac{e^{-p_{\parallel}|x^3 - y^3|}}{2p_{\parallel}}, \qquad p_{\parallel} \equiv |p_E|.$$
 (5.5)

Assim, o termo com  $D_0(x-y,0)$  no lado direito da (5.3) não depende de a e será abandonado (uma vez que não contribui para a força de Casimir). Os termos restantes de W não são divergentes. Após a transformação de Fourier (5.4) e a rotação de Wick obtemos

$$\mathcal{E}_{1} \equiv -\frac{W}{TS} = -\frac{1}{4} \int \frac{d^{3}p_{E}}{(2\pi)^{3}} \frac{\Pi_{j}^{j}(p_{E})}{p_{\parallel}} e^{-2ap_{\parallel}}$$

$$= -\frac{1}{4} \int \frac{d^{3}p_{E}}{(2\pi)^{3}} \frac{\alpha(p_{\parallel}^{2} + \tilde{p}_{\parallel}^{2})\Phi(p_{E})}{p_{\parallel}\tilde{p}_{\parallel}^{2}} e^{-2ap_{\parallel}}.$$
(5.6)

onde nós expandimos  $\Pi_j^j(p_E)$  explicitamente com a ajuda da (2.29).

Esta fórmula está pronta para análise numérica e assintótica, que adiamos até a Seção 5.3.

### 5.2 Abordagem de Lifshitz para a energia de Casimir

Pode-se adotar um outro ponto de vista sobre o efeito Casimir para este sistema e considerar uma teoria efetiva do campo eletromagnético descrita pela ação (3.1) sujeito às condições de contorno (2.21) em  $x^3=a$ . Longe das superfícies, os fótons se propagam livremente. Na superfície do grafeno as equações de Maxwell recebem uma contribuição singular, veja (3.2). Nesta fase, pode-se esquecer a origem de  $\Pi_{\mu}^{\ \nu}$ . A quantização pode ser feita, pelo menos em um nível formal, e até mesmo a teoria de renormalização pode ser desenvolvida, por exemplo ao longo das linhas de [110, 111].

Por outro lado, existe mais um ponto de vista neste problema. Em 1955 Lifshitz demonstrou [59] que a interação de Casimir entre duas placas dielétricas paralelas pode ser expressa de uma forma fechada se suas permissividades dielétricas são conhecidas para frequências imaginárias. A causa dessa força foi considerada como sendo as cargas e as correntes virtuais, que flutuam dentro e fora de existência nos objetos devido à mecânica quântica. Numa série de trabalhos posteriores o cálculo inicial foi generalizado e refinado, e a ligação entre abordagens diferentes foi estabelecida [62, 63, 64, 112]. Em particular, Kats mostrou [62] que, para quaisquer duas interfaces planas paralelas uma a outra e separadas pela distância a, a densidade de energia livre de Lifshitz lê

$$\mathcal{E}_L = \int \frac{d^3 p_E}{16\pi^3} \ln[(1 - e^{-2p_{\parallel}a} r_{\rm TE}^{(1)} r_{\rm TE}^{(2)}) (1 - e^{-2p_{\parallel}a} r_{\rm TM}^{(1)} r_{\rm TM}^{(2)})]$$
 (5.7)

onde  $r_{\text{TE,TM}}^{(1)}$ ,  $r_{\text{TE,TM}}^{(2)}$  são coeficientes de reflexão dos modos eletromagnéticos TE e TM no interface 1 e 2 correspondemente.

Para considerar a interação entre o grafeno e o metal, tem—se de escolher (3.35) como coeficientes de reflexão para o primeiro interface<sup>1</sup>, e os de condutor perfeito

$$r_{\text{TE}}^{(2)} = -1, \quad r_{\text{TM}}^{(2)} = 1.$$
 (5.8)

para o segundo. Como a fórmula de Lifshitz está escrita em termos de momentos euclidianos, observamos que (3.35) também deve ser rotacionada para momentos euclidianos.

A representação em termos de momentos euclidianos da energia de Casimir (5.7)–(5.8) tem várias vantagens. Em primeiro lugar, ela automaticamente leva em conta as contribuições dos possíveis plasmons superficiais sem necessidade de análise explícita [66]. Em segundo lugar, é muito simples considerar seus casos limites e também realizar avaliações numéricas por causa de melhor convergência numérica das integrais.

Pode-se mostrar por cálculo direto que a energia  $\mathcal{E}_1$ , Eq. (5.6), coincide com a ordem principal da expansão perturbativa da fórmula de Lifshitz (5.7)–(5.8), de modo que as duas abordagens são consistentes. Na verdade, a fórmula de Lifshitz é a energia de vácuo "num laço" (um laço fechado) em uma teoria efetiva correspondente à ação (3.1). Como já foi explicado acima, a presença da contribuição singular  $S_{\text{eff}}$  é equivalente às condições (3.4). A imposição de tais condições, por sua vez, é equivalente à soma dos propagadores de fótons com um número arbitrário de inserções–  $\Pi^{mn}$  (ou seja, com um número arbitrário das inserções de laço de férmions). Portanto, a abordagem de Lifshitz corresponde a uma soma parcial de diagramas da abordagem de TQC.

#### 5.3 Comportamento assintótico

As fórmulas (5.6) e (5.7)–(5.8) são adequadas para a avaliação numérica e assintótica. Primeiro vamos considerar o limite de separação grande,  $a \to \infty$ . Introduzindo em (5.7)–(5.8) as variáveis não-dimensionais  $p_E \to p_E a$  somos capazes de expandir o integrando em uma série de potências de 1/a. Cado termo dessa expansão é integrável e em ordem principal obtemos para a energia

$$\mathcal{E}_{L} \mathop{\sim}_{a \to \infty} - \frac{\alpha N}{96\pi^2} \frac{2 + v_f^2}{a^4 \Delta} \,. \tag{5.9}$$

Notamos que a energia neste caso cai com separação a com uma potência mais alta do que a energia para os condutores ideais. Também cabe ressaltar que essa expressão assintótica é de primeira ordem na constante de acoplamento  $\alpha$ .

Devido à estrutura da função  $\Phi(p_E/a)$  no limite de separação curta,  $a \to 0$ , a energia fatora—se em uma parte dependente na distância e em uma função  $h(\alpha, N, v_F)$  independente da separação a, mas contendo todas as potências de  $\alpha$ 

$$\mathcal{E}_{L} \underset{a \to 0}{\sim} \frac{1}{16\pi a^3} h(\alpha, N, v_F). \tag{5.10}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>No caso de temperatura nula e na ausência de um potencial químico põe—se  $A=\Phi,\,B=0,\,$  onde  $\Phi$  é definida na (2.30).

Em ordem principal para  $h(\alpha, N, v_F)$  temos

$$h(\alpha, N, v_F) = -\frac{N\alpha}{16} \left( 1 + \frac{2 + v_F^2}{\sqrt{1 - v_F^2}} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\sqrt{1 - v_F^2}}{v_F}\right) \right) + O(\alpha^2).$$
 (5.11)

Assim vemos que o efeito Casimir nesse modelo mostra algumas características surpreendentes, sendo radicalmente diferente daquele no modelo hidrodinâmico [65]-[67]. No nosso caso a dependência da força na distância torna—se igual à dependência no caso dos condutores ideais para distâncias pequenas, enquanto para distâncias grandes o comportamento da força é totalmente diferente. Tal comportamento é contra—intuitivo uma vez que a contribuição principal em separações pequenas virão do momento de energia alta para qual o filme de grafeno deveria se tornar transparente. Por outro lado, o comportamento para separação grande resulta das contribuições de momento pequeno para as quais o modelo de Dirac é considerado como sendo bem estabelecido, seguindo diretamente da estrutura eletrônica do grafeno.

Da para mostrar que, no caso de férmions sem massa,  $\Delta=0$ , a dependência da energia na distância é a mesma daquela para os condutores ideais e é mantida para todas as distâncias devido à falta de quaisquer parâmetros dimensionais. A magnitude da energia é definida pela mesma assíntota (5.10) igual ao caso  $a \to 0$ .

Passemos agora à avaliação numérica. É conveniente normalizar nossos resultados com a densidade de energia de Casimir para dois condutores ideais separados pela mesma distância a

$$\mathcal{E}_C = -\frac{\pi^2}{720 \, a^3}.\tag{5.12}$$

As quantidades relativas  $\mathcal{E}_1/\mathcal{E}_C$  e  $\mathcal{E}_L/\mathcal{E}_C$  são adimensionais e dependem de um parâmetro adimensional  $a\Delta$ . Para determinar a escala, nota que, para  $\Delta=0.1 \mathrm{eV}$  (valores reais de  $\Delta$  são muito menores)  $a\Delta=1$  corresponde a a=1.97 micrômetros. Os resultados dos cálculos estão representados na Fig. 5.2. Para  $\Delta=0$  as energias normalizadas  $\mathcal{E}_{1,L}/\mathcal{E}_C$  são constantes independente do a como explicado acima.

Assim, podemos ver que a magnitude da interação de Casimir entre o grafeno e o condutor ideal é bastante pequena. A medição real de tais forças fracas é um desafio, mas isso não significa que o problema experimental seja insuperável  $^2$ . Dependência forte na massa  $\Delta$  em separações grandes é também uma característica importante da força de Casimir. Obter uma medição independente da  $\Delta$  pode ser muito importante para a nossa compreensão das propriedades eletrônicas do grafeno. A massa de quase–partículas no grafeno é, provavelmente, muito pequena. Isso melhora a detectabilidade da interação de Casimir desde que a energia aumenta com a diminuição da  $\Delta$ .

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>As dimensões lineares das amostras existentes de grafeno atingem o tamanho de um par de milímetros que está bem acima das exigências dos experimentos [52]. Além disso, a precisão destes experimentos é melhor do que frações de um porcento, o que é suficiente para detetar a interação de Casimir de grafeno.

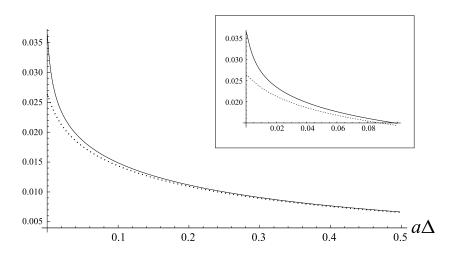


Figura 5.2: As densidades relativas da energia de Casimir  $\mathcal{E}_1/\mathcal{E}_C$  (linha sólida) e  $\mathcal{E}_L/\mathcal{E}_C$  (linha pontilhada) como funções de  $a\Delta$ . Um zoom da região de curtas distâncias é colocado no canto superior direito.

## Capítulo 6

# Efeito Casimir à temperatura não-nula

Neste capítulo, continuamos a estudar a interação de Casimir entre uma camada do grafeno e um metal paralelo. Nas seções anteriores, foi demonstrado que à temperatura nula esta interação é de cerca de 2.6% da interação entre dois condutores ideais separados pela mesma distância.

Mostraremos que à temperatura elevada a interação de Casimir em tal sistema é surpreendentemente forte sendo apenas metade da interação entre dois condutores ideais. Neste limite a camada de grafeno comporta—se exatamente como um metal de Drude. Em particular, a contribuição do modo TE é suprimida, enquanto a do modo TM satura o valor do metal ideal. Nós estudamos o comportamento da interação de Casimir para temperaturas intermediárias com algum detalhe. Também encontramos uma interessante reciprocidade entre duas constantes fundamentais da física do grafeno: a constante de estrutura fina e a velocidade de Fermi.

Baseamos nossas considerações na generalização às temperaturas não—nulas da formula de Lifshitz para energia livre (6.4) que relaciona a interação de Casimir entre dois corpos com seus coeficientes de reflexão. Na Seção 3.3 expressamos esses coeficientes através das componentes do operador de polarização que por sua vez incorpora toda a informação sobre o sistema em analise. Assim, teremos que reformular nosso modelo para incluir a temperatura finita e potencial químico, e, em seguida, derivar um operador de polarização para férmions de Dirac em um tal sistema.

Os resultados desta seção foram publicados em [5].

#### 6.1 Energia livre

A maneira mais simples de introduzir a temperatura é realizar a rotação para as freqüências de Matsubara em todos os diagramas da teoria (veja, por exemplo [113])

$$i \int dq_0 \to -2\pi T \sum_{k=-\infty}^{\infty}, \qquad q_0 \to 2\pi i T \begin{cases} (k+1/2) & \text{linhas femionicas} \\ k, & \text{linhas fotonicas} \end{cases}$$
 (6.1)

Em particular, para o operador de polarização neste caso temos

$$\Pi^{mn}(i\omega_n, \mathbf{p}) = -Te^2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \operatorname{tr}\left(\hat{S}(q_0, \mathbf{q})\tilde{\gamma}^m \hat{S}(q_0 - i\omega_n, \mathbf{q} - \mathbf{p})\tilde{\gamma}^n\right), \tag{6.2}$$

onde  $q_0 = 2i\pi T(k+1/2)$  e  $\omega_n = 2\pi nT$  são frequências de Matsubara, fermiônicas e fotônicas correspondentemente. O propagador de férmions na presença de potencial químico lê—se

$$\hat{S}(q_0, \mathbf{q}) = -\frac{(q_0 + \mu)\gamma_0 - v_F \mathbf{q} - \Delta}{(q_0 + \mu)^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2 - \Delta^2}.$$
(6.3)

Correspondentemente, a densidade de energia livre de Lifshitz à temperatura finita lê-se

$$\mathcal{F} = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{8\pi^2} \ln[(1 - e^{-2p_{\parallel} a} r_{\text{TE}}^{(1)} r_{\text{TE}}^{(2)}) (1 - e^{-2p_{\parallel} a} r_{\text{TM}}^{(1)} r_{\text{TM}}^{(2)})]. \tag{6.4}$$

onde  $p_{\parallel} = \sqrt{\omega_n^2 + \mathbf{p}^2}$ . Os coeficientes de reflexão do grafeno  $r_{\text{TE,TM}}^{(1)}$  em momentos euclidianos podem ser encontrados após a substituição  $p_0 = i2\pi nT = i\omega_n$  nas fórmulas (3.36) com o uso dos componentes de (6.2). Para coeficientes de reflexão do condutor  $r_{\text{TE,TM}}^{(2)}$  vamos continuar a utilizar os valores (5.8).

Para calcular explicitamente (6.2) primeiro usamos a parametrização de Feynman

$$\frac{1}{ab} = \int_0^1 \frac{dx}{(xa + (1-x)b)^2}$$

e, posteriormente, mudamos as variáveis na parte espacial da integração de laço:  $\mathbf{q} \to \mathbf{q} + x\mathbf{p}$ . Assim, para a componente temporal chegamos a

$$\Pi^{00} = -2e^2TN \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^1 dx \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{M_0^2 - (q_0 + \mu)(p_0 - q_0 - \mu)}{[(q_0 + \mu - xp_0)^2 - \Theta^2]^2}$$

com  $M_0^2 = \Delta^2 + v_F^2 \mathbf{q}^2 - x(1-x)v_F^2 \mathbf{p}^2$  e

$$\Theta^2 = \Delta^2 + v_F^2 \mathbf{q}^2 - x(1-x)(p_0^2 - v_F^2 \mathbf{p}^2).$$

O somatório sobre as frequências fermiônicas de Matsubara pode ser feito de forma explícita

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[(2\pi i T(k+1/2)-b)^2 - \Theta^2]^2}$$
 (6.5)

$$=-\frac{1}{16\Theta^3T^2}\left(\Theta\;\mathrm{sech}^2\left(\frac{\Theta+b}{2T}\right)-2T\tanh\left(\frac{\Theta+b}{2T}\right)\right)+(\Theta\to-\Theta).$$

A integração- $\mathbf{q}$  também pode ser realizada diretamente usando  $\partial_y \tanh y = \mathrm{sech}^2 y$ . Apenas a integração sobre x permanece após estas transformações, e chegamos à seguinte representação para  $\Pi_{00}$ 

$$\Pi_{00} = -\frac{2N\alpha T}{v_F^2} \int_0^1 dx \left( f_{00} \tanh \frac{\Theta_0 + b}{2T} - \ln \left( 2 \cosh \frac{\Theta_0 + b}{2T} \right) + (\Theta_0 \to -\Theta_0) \right)$$
(6.6)

onde 
$$\Theta_0 \equiv \sqrt{\Delta^2 - x(1-x)(p_0^2 - v_F^2 \mathbf{p}^2)}, b = p_0 x - \mu, e$$

$$f_{00} = \frac{-2v_F^2 \mathbf{p}^2 x (1-x) - p_0 (1-2x)\Theta_0 + 2\Theta_0^2}{4T\Theta_0}.$$
 (6.7)

Com cálculo muito semelhante obtemos para  $\Pi_{\rm tr}$ 

$$\Pi_{\rm tr} = -\frac{2N\alpha T}{v_F^2} \int_0^1 dx \left( f_{tr} \tanh \frac{\Theta_0 + b}{2T} - \ln \left( 2\cosh \frac{\Theta_0 + b}{2T} \right) + (\Theta_0 \to -\Theta_0) \right)$$
(6.8)

$$f_{\rm tr} = \frac{2\Delta^2 v_F^2 + 2x(1-x)v_F^2 p_3^2}{4T\Theta_0} - \frac{p_0(1-2v_F^2)(1-2x) - 2(1-v_F^2)\Theta_0}{4T}.$$
 (6.9)

Lembramos que N é o número de espécies de férmions, N=4 para o grafeno. As partes ímpares do tensor de polarização cancelam—se entre as espécies diferentes, enquanto as contribuições pares se somam.

Notamos aqui que a expressão (2.26) é divergente por contagem de potências. Uma divergência ultra-violeta aparece na parte de traço  $\Pi_m^m$ . Para remover esta divergência foi realizada a subtração de Pauli-Villars em massa infinita, que é um processo bastante padrão, veja Sec. 4.2.3. Pode-se verificar que o limite  $\Delta \to \infty$  da (6.6) é de fato zero.

Na seção seguinte, consideramos os assintóticos da energia livre do sistema grafeno e metal ideal para temperaturas altas (separações grandes), enquanto na seção subseqüente 6.3 estudamos o caso  $\Delta = \mu = 0$  e discutimos os resultados numéricos.

### 6.2 Limite de temperatura alta

Como discutido na Introdução, o limite de temperatura elevada é o regime mais intrigante na física do efeito de Casimir. Neste limite, para distâncias  $H \equiv 4\pi aT \gg 1$ , os termos de freqüência nula de Matsubara determinam a energia livre uma vez que outros termos são suprimidos exponencialmente nessas separações. Como mostraremos abaixo, para freqüência nula  $r_{\rm TM} \sim 1$ ,  $r_{\rm TE} \sim \alpha N v_F^2 |\mathbf{p}|$  para valores pequenos do vetor de onda  $|\mathbf{p}|$ . Assim, o coeficiente  $r_{\rm TM}$  adquire o valor do metal ideal, e esta é a característica principal do grafeno em temperaturas altas. Ao mesmo tempo, a energia livre de modo TE para interação grafeno-metal é suprimida em separações  $a \gtrsim 1/(4\pi T)$  por um fator  $\alpha N v_F^2/(aT) \ll 1$ . Devido a esta supressão a diferença entre os resultados para o metal ideal, metal de Drude ou o modelo de plasma é demasiado pequeno para ser observado em experimentos reais.

A contribuição principal da soma em (6.4) com aT grande é dada pelo termo de freqüência nula de Matsubara,

$$\mathcal{F}_0 = \frac{T^3}{4\pi} \int_0^\infty s ds \ln\left(1 + r_{\text{TE}}e^{-2aTs}\right) \left(1 - r_{\text{TM}}e^{-2aTs}\right)$$
 (6.10)

onde realizamos também a integração angular e redimensionamento do momento,  $s = |\mathbf{p}|/T$  em relação a (6.4). A expansão em potências de aT é determinada pelo comportamento do integrando na (6.10) no limite  $s \to 0$ . Para obter assíntotas correspondentes notamos primeiro

que os componentes do tensor de polarização para  $\omega_n = 0$  se comportam como

$$\Pi_{00} \underset{s \to 0}{\simeq} \frac{2NT\alpha}{v_F^2} \left( \ln \left( 2\cosh \frac{\Delta + \mu}{2T} \right) - \frac{\Delta}{2T} \tanh \frac{\Delta + \mu}{2T} + (\mu \to -\mu) \right) + \tag{6.11}$$

$$+\frac{\alpha N T^2 s^2}{24 \Delta} \left(2 \tanh \frac{\Delta + \mu}{2T} + \frac{\Delta}{2T} \tanh^2 \frac{\Delta + \mu}{2T} - m + (\mu \rightarrow -\mu)\right) + O(s^4)$$

$$\Pi_{\rm tr} - \Pi_{00} \underset{s \to 0}{\simeq} \frac{\alpha N T^2 v_F^2 s^2}{12\Delta} \left( \tanh \frac{\Delta + \mu}{2T} + (\mu \to -\mu) \right) + O(s^4).$$
(6.12)

A partir disso, deduzimos facilmente que

$$r_{\text{TE}} \underset{s \to 0}{\simeq} -\frac{\alpha N T v_F^2 s}{6\Delta} \left( \tanh \frac{\Delta + \mu}{2T} + (\mu \to -\mu) \right) + O(s^2),$$
 (6.13)

$$r_{\text{TM}} \underset{s \to 0}{\simeq} 1 - \frac{sv_F^2/(\alpha N)}{\ln\left(2\cosh\frac{\Delta+\mu}{2T}\right) - \frac{\Delta}{2T}\tanh\frac{\Delta+\mu}{2T} + (\mu \to -\mu)} + O(s^2). \tag{6.14}$$

onde supomos que  $\Delta$  e  $\mu$  são da ordem da temperatura T, que pode ser relevante para algumas amostras do grafeno e/ou as configurações experimentais. Note—se que todas as fórmulas desta seção também são válidas para  $\Delta, \mu \to 0$ , desde que o limite  $s \to 0$  é essencialmente o mesmo limite que  $T \to \infty$ .

Tomando o termo principal da expansão do logarítmo na (6.10) e usando (6.13) obtemos a contribuição principal TE em separações grandes

$$\mathcal{F}_{0TE} \simeq -\frac{\alpha N T v_F^2}{192\pi m a^3} \left( \tanh \frac{m+\mu}{2T} + (\mu \to -\mu) \right). \tag{6.15}$$

Para o modo TM não tem como usar a expansão de  $\ln(1 - r_{\rm TM}e^{-2aTs})$  uma vez que ela é divergente perto de s = 0, veja (6.14). Em vez disso tem de usar a representação

$$\mathcal{F}_{0\text{TM}} = \frac{T^3}{4\pi} \int_0^\infty s ds \left( \ln \left( 1 - e^{-2aTs} \right) + \ln \left( 1 - \frac{r_{\text{TM}} - 1}{1 - e^{-2aTs}} e^{-2aTs} \right) \right). \tag{6.16}$$

A integral do primeiro termo pode ser feita explicitamente dando

$$\mathcal{F}_{0\text{TM}}^{(0)} = -\frac{k_B T \zeta(3)}{16\pi a^2} \equiv \mathcal{F}_{\text{Drude}}|_{T \to \infty} = \frac{1}{2} \mathcal{F}_{\text{id}}|_{T \to \infty}, \tag{6.17}$$

que coincide exatamente com a interação de dois metais reais à temperatura alta descritas pelo modelo de Drude, ou, equivalentemente, metade da interação entre dois metais ideais a mesma temperatura.

No restante da (6.16) pode-se usar a expansão

$$\mathcal{F}_{0\text{TM}}^{(1)} = -\frac{T^3}{4\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l} \int_0^{\infty} s ds \left( \frac{r_{\text{TM}} - 1}{1 - e^{-2aTs}} \right)^l e^{-2laTs}.$$
 (6.18)

Como a contribuição principal para as assíntotas em  $H \to \infty$  vem da proximidade de s=0

podemos expandir  $r_{\rm TM}-1$  em uma série de Taylor em torno desse ponto, para obter

$$\mathcal{F}_{0TM}^{(1)} \simeq -\frac{T^3}{4\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\left(r_{TM}^{(1)}\right)^l}{l} \int_0^{\infty} s^{l+1} (1+O(s)) \left(\frac{e^{-2aTs}}{1-e^{-2aTs}}\right)^l ds$$

$$= -\frac{T^3}{4\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l} \frac{\left(r_{TM}^{(1)}\right)^l C_l}{(2aT)^{l+2}} \left(1+O\left(\frac{1}{2aT}\right)\right) \simeq -\frac{T^3}{4\pi} \frac{r_{TM}^{(1)} C_1}{(2aT)^3} = -\frac{\zeta(3) r_{TM}^{(1)}}{16\pi a^3} \quad (6.19)$$

onde  $C_l = \int_0^\infty s^{l+1} \left(\frac{e^{-s}}{1-e^{-s}}\right)^l ds$  e  $r_{\rm TM}^{(1)} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial s} r_{\rm TM}\right)_{s=0}$ , que pode ser deduzida a partir de (6.14). No grafeno, onde  $v_F^2/(\alpha N) \ll 1$ , esta correção já é pequena para  $H = 4\pi aT \gtrsim 1$ , mas em outros sistemas de Dirac com maior  $v_F$ , a transição de  $\mathcal{F}_{\rm OTM}$  (6.16) para assíntotas (6.17) ocorreria apenas em distâncias muito maiores  $aT \gg v_F^2/(\alpha N)$ . Chamamos a atenção do leitor que, em qualquer caso, esta condição não define a transição para o regime de alta temperatura de toda a energia livre (6.4) mas sim do termo de frequencia nula de Matsubara.

Assim, podemos dizer, que a partir das (6.15), (6.17) e (6.19), segue-se que para separações grandes a contribuição principal para a interação de uma camada do grafeno suspenso com o condutor ideal vem da contribuição principal de TM modo (6.17). Assintoticamente esta contribuição constitui apenas metade da interação entre dois metais ideais em separações grandes. Este fato é induzido pela dependência específica dos coeficientes de reflexão de modos TE e TM no momento  $s = |\mathbf{p}|/T$  para s pequeno, veja (6.13), (6.14). Como mencionado anteriormente, tal comportamento dos  $r_{\rm TM,E}$  também faz nossas previsões insensíveis em separações grandes das diferenças entre os modelos diferentes de condutividade do metal real. A análise numérica mostra que a diferença entre a energia livre do grafeno e o metal ideal, e a energia do grafeno e o ouro, torna-se pequena já em  $a \gtrsim 100$ nm a T = 300K (veja Fig.6.2) e diminui rapidamente com separações mais elevados. Além disso, neste limite a interação de duas amostras do grafeno suspensos irá adquirir exatamente o mesmo valor assintótico.

Como foi mostrado no capítulo anterior, no limite de temperatura nula a força de Casimir entre o grafeno e o metal ideal é de cerca de 2.6% da força entre dois metais ideais. Como podemos ver, no limite oposto o rácio entre energia livre do sistema metal—grafeno e a do sistema metal—metal é fortemente reforçado. Esse reforço ocorre devido à estrutura não—perturbativa da formula de Lifshitz no limite  $v_F = 0$ .

#### 6.3 Outros análises e os resultados numéricos

Dado os valores específicos de  $\Delta$  e  $\mu$ , a interação de Casimir pode ser avaliada usando a fórmula de Lifshitz, os coeficientes de reflexão e o operador de polarização. Como mostra nosso análise numérica, aumentando a massa diminui a interação de Casimir, enquanto a inclusão da potencial químico diferente de zero aumenta a interação. No entanto, a diferença nos valores da energia livre para  $\Delta, \mu \sim 0.01 {\rm eV}$ , que são limites razoáveis para estas quantidades em amostras suspensas de grafeno, e para  $\Delta = \mu = 0$ , é inferior a um porcento. Portanto no que se segue, nós nos limitamos ao caso de  $\Delta = \mu = 0$  e o estudamos em detalhe.

Na Fig.6.1 marcamos a razão  $\rho_1$  da energia livre de Lifshitz  $\mathcal{F}$  (6.4) pelas assíntotas de temperatura alta  $\mathcal{F}^{(0)}_{0\mathrm{TM}}$  (6.17) a  $T=300\mathrm{K}$  para dois sistemas: grafeno-metal ideal e metal

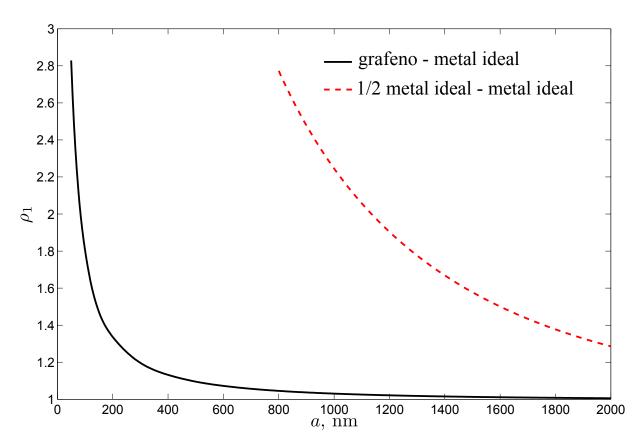


Figura 6.1: A razão  $\rho_1$  entre a energia livre e as assíntotas de temperatura alta  $\mathcal{F}^{(0)}_{0\mathrm{TM}}$ , veja equação (6.17). Ambos os gráficos são calculados para  $T=300\mathrm{K}$ . No grafeno foram utilizados os valores  $\Delta=\mu=0$ .

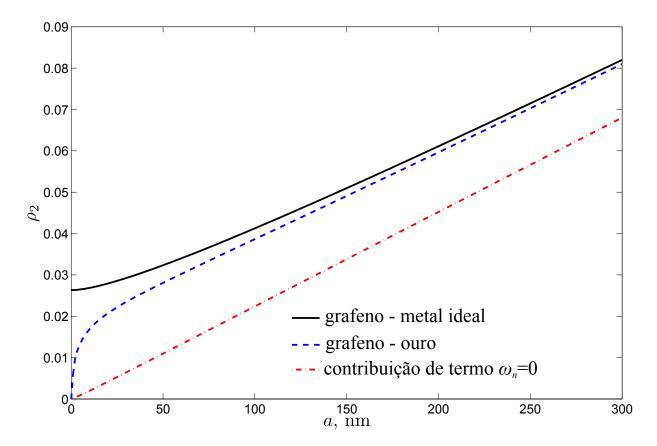


Figura 6.2: A razão  $\rho_2$  entre a energia livre para o sistema metal-grafeno ( $\mu = \Delta = 0$ ) e a energia do sistema metal-metal a T = 300K.

ideal-metal ideal. Da Fig. 6.1 é evidente que a energia livre para o sistema grafeno-metal ideal se aproxima dos valores assintóticos muito mais rápido do a energia para o sistema metal ideal-metal ideal. O que explica esse fenômeno é o comportamento particular dos componentes do operador de polarização em freqüências diferentes de zero

$$\Pi_{00}(\omega_n) \underset{|\mathbf{p}| \to 0}{\simeq} \frac{\alpha \mathbf{p}^2 c_n}{T} + O(\mathbf{p}^4), \qquad \Pi_{\mathrm{tr}}(\omega_n) \underset{|\mathbf{p}| \to 0}{\simeq} \alpha T \tilde{c}_n + O(\mathbf{p}^2), \qquad n \ge 1,$$

que induzem supressão adicional  $O(\alpha)$  das contribuições correspondentes. Aqui,  $c_n$ ,  $\tilde{c}_n$  são fatores de ordem da unidade. Devido a esta supressão o termo TM de frequência nula de Matsubara é dominante na energia livre de Lifshitz para o sistema de grafeno-metal em separações muito mais curtos do que no caso de sistema metal-metal.

Vamos definir os regimes separadamente baseando no comportamento de escala da energia livre, em vez de utilizar as várias aproximações. Como função da distância temos  $\mathcal{F} \sim a^{-3+\delta}$ , onde  $\delta = 0$  a T = 0 e  $\delta = 1$  a  $T \to \infty$ . O parâmetro de escala  $\delta$  varia lentamente, e assim pode ser definido através de uma derivada logarítmica

$$\delta = a \frac{d}{da} \left[ \ln a^3 |\mathcal{F}| \right]. \tag{6.20}$$

Como estamos apenas interessados em estimativas, é suficiente aproximar  $\mathcal{F}$  como uma função

racional

$$\mathcal{F} \simeq -\frac{U + aV}{16\pi a^3} \,, \tag{6.21}$$

onde U pode ser definido pelo valor da energia a T=0, e V é calculado através da assíntot de temperatura alta, (6.17). Ou seja,

$$U = \frac{\alpha N}{8} \left[ \ln \left( 1 + \frac{8}{\alpha N \pi} \right) + \frac{1}{2} \right], \qquad V = T\zeta(3).$$
 (6.22)

Consequentemente, (6.20) dá

$$aT = \frac{U\delta}{\zeta(3)(1-\delta)}. (6.23)$$

Podemos definir o regime de "temperatura nula" como aquele onde  $\delta$  está próximo a seu valor a T=0, digamos  $\delta\lesssim 0.2$ , dando  $aT\lesssim 0.004$  ou  $a\lesssim 30$ nm a T=300K. O regime de temperatura elevada, por outro lado, pode ser definido como  $\delta\gtrsim 0.8$  correspondendo a  $aT\gtrsim 0.06$ , ou  $a\gtrsim 460$ nm a T=300K. Numericamente, esse limite está muito perto da condição original,  $H\gg 1$ , que é universal para qualquer sistema de Casimir. No entanto, na interação entre o grafeno e o metal, como já discutido, as assíntotas de alta temperatura já estão saturados em  $H\sim 1$ , veja Fig. 6.1. Isto também pode ser visto considerando escalas 'intermediárias'. Em distâncias correspondentes a  $\delta=1/2$ , onde  $H\approx 2\pi\alpha\ln\alpha^{-1}/\zeta(3)\approx 0.19$  é ainda menor que a unidade, a assíntota da temperatura alta já se torna maior do que a contribuição de T nula, ou seja, aV>U, e, portanto, este ponto pode ser considerado (formalmente) como um cruzamento entre as regiões de temperaturas altas e nulas.

Notamos também que o parâmetro U que governa as transições entre regimes diferentes é definido por  $\alpha$  e não depende de  $v_F$ . Não se deve, porém, superestimar esse fato. Todas as nossas expressões são válidas apenas para as pequenas  $v_F$ . Em tal caso, a energia livre se comporta, muito aproximadamente, como uma soma da contribuição de temperatura nula e termo de frequência nula de Matsubara. Portanto, o cruzamento entre diferentes regimes é definido pela relação entre estas duas contribuições.

Na Fig. 6.2 marcamos a razão  $\rho_2$  entre a energia livre do sistema grafeno-metal e a energia do sistema metal-metal para separações abaixo de 300 nm. A temperatura é escolhida como  $T=300{\rm K}$ , o que significa que  $H=4\pi aT$  varia na Fig. 6.2 de zero até 0.49. Em cálculos numéricos da energia livre de semi-espaço de ouro e camada de grafeno paralelo nós usamos o modelo de plasma para descrição do ouro,  $\varepsilon_G(i\omega)=1+\omega_p^2/\omega^2$  com a freqüência de plasma igual a  $\omega_p=9.0{\rm eV}$ . Os coeficientes de reflexão de ouro são os coeficientes de Fresnel padrão com  $\varepsilon_G(\omega)$ , veja [61]. O resultado numérico para a energia livre do sistema ouro-grafeno dividido pela energia livre do sistema de metal-metal é mostrado pela curva tracejada na Fig. 6.2. Note-se que o comportamento da energia livre de ouro-grafeno em separações curtas é uma potencia de a diferente daquele na energia do sistema grafeno-metal ideal. Esta é uma mudança comum na lei de potência, quando o sistema passa do regime retardado para um não-retardado, e acontece nas separações caracterizadas por comprimento de onda do material igual a  $\lambda_p=2\pi/\omega_p$ . Assim, a interação de metal real com grafeno é essencialmente diferente da interação de metal ideal com grafeno somente em separações curtas. A curva solida, que corresponde ao termo isolado de frequência nula de Matsubara é quase linear. Isto reflete o fato que, como mencionado acima,

a expansão de  $\mathcal{F}_{0\text{TM}}$  em torno das assíntotas de alta temperatura  $\mathcal{F}_{0\text{TM}}^{(0)}$  é governada por um pequeno parâmetro  $v_F^2/(\alpha N)$ , enquanto que o termo  $\mathcal{F}_{0\text{TE}}$  é suprimido por um fator  $\alpha N v_F^2$ .

Finalmente, uma comparação com trabalhos prévios sobre o assunto está em ordem. Como mencionado anteriormente, os valores assintóticos principais para a energia livre do sistema de grafeno—metal em separações grandes (6.17) coincidem com valores assintóticos do sistema grafeno—grafeno. Assim, nossos achados corroboram os resultados da Ref. [72] onde a interação térmica de van der Waals foi estudada no sistema grafeno—grafeno. No entanto, a nossa previsão para a distância característica que separa os regimes de temperatura nula e de temperatura alta (como discutido abaixo da Eq. (6.23)) difere da previsão de Ref. [72]. No nosso caso, ela não depende da velocidade de Fermi  $v_F$  mas sim da constante de estrutura fina  $\alpha$ , enquanto em [72] a distância característica é proporcional a  $v_F$  sem dependência de  $\alpha$ . Não há contradição direta, no entanto, uma vez que sistemas físicos diferentes têm sido estudados em nossas obras. Nós discordamos o artigo [73], onde não foi encontrada praticamente nenhuma dependência na temperatura da interação de Casimir do grafeno (e que, consequentemente, também contradiz [72]). Ainda assim, a estimativa para o caso da temperatura nula dada em [73] coincide com os nossos cálculos anteriores [2]. Finalmente, as separações considerados em [71] são demasiado pequenas para permitir uma comparação com os nossos resultados.

Unidades físicas podem ser restaurados em nossas fórmulas seguindo a simples regra: para resultados expressos na potência adequada de aT s divididos por  $a^3$ , o produto aT será substituído por  $k_B aT/(\hbar c)$ , enquanto  $1/a^3$  deve ser substituído por  $\hbar c/a^3$ .

## Capítulo 7

## Comentários finais

Neste trabalho apresentamos a investigação de vários fenômenos quânticos, tanto em monocamadas suspensas quanto em camdas epitaxiais de grafeno. Os assuntos principais foram a investigação das propriedades ópticas do grafeno no campo magnético externo, e do efeito Casimir.

Para explorar esses efeitos foi utilizada uma abordagem da Teoria Quântica de Campos para a física do grafeno. A relação de dispersão quase-relativística das excitações eletrônicas no grafeno, juntamente com a sua massa (quase) nula faz da TQC uma linguagem mais adequada para descrever propriedades do grafeno, em oposição à mecânica quântica não-relativística.

Seguindo esta abordagem, nós começamos com a ação de Dirac-Maxwell, onde os espinores estão confinados à superfície do grafeno, enquanto o campo electromagnético se propaga no espaço 3+1 dimensional. O campo eletromagnético não foi quantizado, e foi dado por uma soma de um campo magnético constante e um flutuante (fótons). Quando necessário o campo magnético foi levado em conta exatamente, enquanto para os fótons nós sempre mantivemos apenas os termos de segunda ordem. Portanto, do lado da TQC calculamos um diagrama de só um loop, porém, bastante complicado — dependendo do campo magnético, do potencial químico, da massa, e de um parâmetro que descreve fenomenologicamente as impurezas. Este cálculo é similar a outros apresentados na literatura, mas foi feito de forma diferente seguindo as necessidades de nossa investigação.

Realizando esse procedimento para sistemas particulares, na primeira parte da pesquisa foram investigadas as propriedades óticas gerais do sistema planar descrito por um potencial—delta tensorial incluído nas equações clássicas de Maxwell. No caso do grafeno este potencial é definido pelo operador de polarização das quase—partículas — o diagrama de um loop mencionada acima. Nós estabelecemos uma clara conexão entre os seus componentes e as propriedades óticas do grafeno ambos suspenso e epitaxial.

Para fins de comparação com um experimento recente, recalculamos o operador de polarização no campo magnético externo. Baseando-se neste cálculo mostramos que em um número de regimes diferentes a rotação da polarização da luz que passa através de monocamada de grafeno é gigante, sendo da ordem de 0.1 rad, enquanto a absorção pode atingir 40%.

Em particular, mostramos que as previsões do modelo de Dirac estão em boa concordância com os resultados experimentais recentes sobre a transmissão e a rotação de Faraday gigante

em regime de ressonância cíclotron. Além disso, previmos que para potenciais químicos menores (característicos do grafeno suspenso), o efeito é ainda muito pronunciado, mas ocorre em freqüências mais elevadas. Nós também revelamos que em amostras de grafeno limpo a rotação de Faraday como uma função do potencial químico deve ser quantizada de uma forma similar ao efeito Hall não convencional inteiro.

A outra parte da pesquisa foi dedicada à investigação do efeito Casimir entre a camada de grafeno suspenso e o condutor ideal. Considerando o caso de temperatura nula seguimos duas rotas diferentes — primeiro adotando a abordagem perturbativa da TQC e depois a abordagem de Lifshitz. Foi demonstrado que ambas abordagens são consistentes em ordem  $O(\alpha)$  prevendo a força de Casimir entre a filme suspenso do grafeno e o condutor ideal em aproximadamente 2.6% da força entre dois condutores ideais.

Foi estudada também a energia livre de Lifshitz para o sistema grafeno—metal à temperatura nao-nula e foram obtidos esultados que podem ser prontamente utilizados para a comparação da teoria com experimentes à temperatura ambiente e para diferentes separações. Também mostramos que a temperaturas altas (separações grandes), a energia livre de interação entre a amostra suspensa de grafeno e o metal paralelo comporta—se assintoticamente como a interação entre duas superfícies condutoras descritas pelo modelo de Drude. Isto produz uma interação de Casimir muito forte, algo surpreendente para um material de um átomo de espessura. Esta característica fornece uma oportunidade excelente para os estudos experimentais do efeito Casimir neste sistema à temperatura ambiente e separações grandes. A energia em separações grandes é essencialmente insensível ao modelo que foi realmente utilizado para a descrição da condutividade do metal.

Em ambos os casos, consideramos uma amostra de grafeno suspenso. Em tal amostra os valores de  $\Delta$  e  $\mu$  são pequenos e, como mostram nossos estudos numéricos, a sua influência sobre a interação de Casimir é desprezível. Com as técnicas experimentais de hoje que resolvem a força de Casimir com o erro total da ordem de frações de 1%, acreditamos que um experimento baseado no grafeno seja uma tarefa perfeitamente viável ainda que difícl.

Do ponto de vista teórico, é interessante notar que na investigação de todos os efeitos nós começamos com um modelo da TQC à temperatura finita totalmente consistente, e que o tensor de polarização (i.e., a condutividade da superfície do grafeno) foi, assim, dependente da temperatura.

#### Agradecementos

O autor cordialmente reconhece o apoio financeiro da FAPESP sob projeto 2008/06041-2.

# Referências Bibliográficas

- [1] I. V. Fialkovsky, D.V. Vassilevitch, *Parity-odd effects and polarization rotation in graphene*, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009) 442001, arXiv: 0902.2570 [hep-th]
- [2] M. Bordag, I. V. Fialkovsky, D. M. Gitman, D. V. Vassilevich Casimir interaction between a perfect conductor and graphene described by the Dirac model Phys. Rev. B 80, 245406 (2009), arXiv: 0907.3242 [hep-th]
- [3] M. Bordag, I. V. Fialkovsky, D. M. Gitman, D. V. Vassilevich, *Polarization rotation and Casimir effect in suspended graphene films*, arXiv:1003.3380 [hep-th]
- [4] I. V. Fialkovsky, Suspended graphene films and their Casimir interaction with ideal conductor, Proceedings of QFEXT09, World Scientific 2009, p. 255, arXiv:0910.1940 [cond-mat.mes-hall]
- [5] I. V. Fialkovsky, V. Marachevsky, D. V. Vassilevich, Finite temperature Casimir effect for graphene, Phys. Rev. **B** 84, 035446 (2011), arXiv:1102.1757[hep-th].
- [6] I. V. Fialkovsky, D. V. Vassilevich, Quantum Field Theory in Graphene, IJMPA 27, 1260007 (2012), Proceedings of QFEXT'11, arXiv:1111.3017.
- [7] I. V. Fialkovsky, D. V. Vassilevich, Faraday rotation in graphene, submitted for publication, arXiv:1203.4603.
- [8] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004);
- [9] K.S. Novoselov, D. Jiang, T. Booth, V.V. Khotkevich, S.M. Morozov, and A.K. Geim, Proc. Nat. Acad. Sc. 102, 10451 (2005).
- [10] A.K. Geim and K.S. Novoselov, Nature Materials 6, 183 (2007).
- [11] M. Wilson, Phys. Today, January 2006, 21.
- [12] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009). A.H. Castro Neto, F. Guinea, and N.M. Peres, *Physics World* 19, 33 November (2006).
- [13] M.I. Katsnelson and K.S. Novoselov, Solid State Comm. 143, 3 (2007).
- [14] T. Chakraborty, *Physics in Canada* **62**, 351 (2006).

- [15] M.I. Katsnelson, Mater. Today 10, Issue 1&2, 20 (2007).
- [16] K. Yang, Solid State Comm. 143, 27 (2007).
- [17] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984)
- [18] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Phys. Rev. B 29, 1685 (1984)
- [19] E. Fradkin, E. Dagotto, and D. Boyanovsky, Phys. Rev. Lett. 57, 2967 (1986), ibid 58, 961(E) (1987); D. Boyanovsky, E. Dagotto, and E. Fradkin, Nucl. Phys. B 285[FS19], 340 (1987).
- [20] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [21] A.M.J. Schakel, Phys. Rev. D 43, 1428 (1991).
- [22] J. Gonzàlez, F. Guinea, and M.A.H. Vozmediano, Nucl. Phys. B 406, 771 (1993); ibid. 424, 595 (1994).
- [23] J. Gonzàlez, F. Guinea, and M.A.H. Vozmediano, Phys. Rev. Lett. 77, 3589 (1996); Phys. Rev. B 59, R2474 (1999); Phys. Rev. B 63, 134421 (2001).
- [24] D.V. Khveshchenko, Phys. Rev. Lett. 87, 206401 (2001); ibid. 87, 246802 (2001).
- [25] E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, V.A. Miransky, and I.A. Shovkovy, Phys. Rev. B 66, 045108 (2002).
- [26] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* 438, 197 (2005).
- [27] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim, Nature 438, 201 (2005).
- [28] Y. Zheng and T. Ando, Phys. Rev. B 65, 245420 (2002).
- [29] V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Phys. Rev. Lett. 95, 146801 (2005);
- [30] N.M.R. Peres, F. Guinea, and A.H. Castro Neto, Phys. Rev. B 73, 125411 (2006).
- [31] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, Science 320, 1308 (2008).
- [32] M.I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A.K. Geim, Nature Phys. 2, 620 (2006).
- [33] A. Calogeracos, Nature Phys. 2, 579 (2006).
- [34] J. Cserti and G. Dávid, Phys. Rev. B 74, 172305 (2006).
- [35] A. B. Kuzmenko, E. van Heumen, F. Carbone, and D. van der Marel, Phys. Rev. Lett. 100, 117401 (2008).
- [36] T. Ando, Y. Zheng and H. Suzuura, J. Phys. Soc. Jpn. 71, 1318 (2002).
- [37] L. A. Falkovsky and S. S. Pershoguba, Phys. Rev. B 76, 153410 (2007).

- [38] T. Stauber, N. M. R. Peres and A. K. Geim, Phys. Rev. B 78, 085432 (2008).
- [39] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger\* and W. A. de Heer, Phys. Rev. Let. 97, 266405 (2006).
- [40] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger and W. A. de Heer, Int. J. M. Phys. B 21, 1145-1154 (2007). A. M. Witowski, et al., Phys. Rev. B 82, 165305 (2010)
- [41] Orlita M. et al., Solid State Commun. 149, 1128 (2009); Orlita M. et al., Phys. Rev. Let. 101, 267601 (2008).
- [42] I. Grassee, J. Levallois, A. L. Walter, M. Ostler, A. Bostwick, E. Rotenberg, T. Seyller, D. van der Marel and A. B. Kuzmenko, Nature Physics 7, 48 (2011), arXiv:1007.5286v1 [cond-mat.mes-hall]
- [43] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. B **73** (2006) 245411.
- [44] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov and J.P. Carbotte, Int.J.Mod.Phys.B **21** (2007) 4611, ar-Xiv:0706.3016v2 [cond-mat.mes-hall]
- [45] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte, New J. Phys. 11 (2009) 095013, [ar-Xiv:0908.2803v2].
- [46] P. K. Pyatkovskiy, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 025506.
- [47] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte, J. Phys. Condens. Matter 19, 026222 (2007).
- [48] P. K. Pyatkovskiy, V. P. Gusynin, Phys. Rev. B83, 075422 (2011). [arXiv:1009.5980 [cond-mat.str-el]].
- [49] T. Morimoto, Y. Hatsugai, H. Aoki, Phys. Rev. Lett. 103, 116803 (2009), arXiv:0904.2438v2
- [50] V. A. Volkov and S. A. Mikhailov, JETP Letters 41, 474 (1985).
- [51] H.B.G.Casimir, Proc.Kon.Nederl.Akad.Wet.51 (1948) 793
- [52] M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko, Advances in the Casimir effect, (Oxford University Press, Oxford, 2009).
  M. Bordag, U. Mohideen and V. M. Mostepanenko, Phys. Rept. 353, 1 (2001) [arXiv:quant-ph/0106045].
- [53] Klimchitskaya, G.L., Mohideen, U., Mostepanenko, V.M.: The Casimir force between real materials: Experiment and theory. Rev. Mod. Phys. 81, 1827–1885 (2009)
- [54] K. A. Milton, The Casimir effect: Physical manifestations of zero-point energy, (World Scientific, River Edge, 2001);
- [55] F. Capasso, et al., IEEE J. Sel. Top. Quant. 13, 400-414 (2007); H.B. Chan, et al., Science 291, 1941-1944 (2001).

- [56] S.K. Lamoreaux, Phys. Rev. Lett. 78, 5–8 (1997).
- [57] U. Mohideen, Roy, A., Phys. Rev. Lett. 81, 4549-4552 (1998). A. Roy, Lin, C.Y., Mohideen,
   U., Phys. Rev. D 60, 111101(R) (1999).
- [58] F. Chen, et al., Phys. Rev. Lett. 88, 101801 (2002); Phys. Rev. Lett. 97, 170402 (2006)
- [59] Lifshitz, E.M.: The Theory of Molecular Attractive Forces between Solids. Sov. Phys. JETP 2, 73–83 (1956)
- [60] Dzyaloshinskii, I.E., Lifshitz, E.M., Pitaevskii, L.P.: The general theory of van der Waals forces. Adv. Phys. 10, 165–209 (1961)
- [61] Lifshitz, E.M., Pitaevskii, L.P.: Statistical Physics Part 2. Pergamon Press (1980)
- [62] E.I.Kats, Zh.Eksp.Teor.Fiz. 73, 212 (1977) (Sov.Phys.JETP 46, 109 (1977))
- [63] M. T. Jaekel and S. Reynaud. Journal De Physique I, 1(10), 1395–1409, (1991).
- [64] M. Bordag, J. Phys., A28: 755–766, 1995.
- [65] G. Barton. J.Phys.A **38** (13), 2997 (2005).
- [66] M. Bordag, J. Phys. A **39**, 6173 (2006) [arXiv:hep-th/0511269].
- [67] M. Bordag, B. Geyer, G. L. Klimchitskaya and V. M. Mostepanenko, Phys. Rev. B 74, 205431 (2006).
- [68] A. L. Fetter. Annals of Physics, 81, 367, (1973).
- [69] G. Barton. J. Phys. A: Math. Gen., 37, 1011, (2004).
- [70] J. Wintterlin and M.-L. Bocquet, Surface Science 603, 1841 (2009); D. Jiang, M-H. Du and
   S. Dai, J. Chem. Phys. 130, 074705 (2009).
- [71] J. F. Dobson, A. White, and A. Rubio, Phys.Rev.Lett.**96**, 073201 (2006).
- [72] G. Gómez-Santos, Phys. Rev. B 80, 245424 (2009).
- [73] D. Drosdoff and L. M. Woods, "Casimir Forces and Graphene Sheets", [arXiv:1007.1231 [cond-mat.mes-hall]]
- [74] I. Brevik, S. E. Ellingsen, and K. A. Milton, New J. Phys. 8, 236 (2006).
- [75] K. A. Milton, J.Phys.A: Math.Gen. **37**, 209 (2004).
- [76] P. R. Buenzli and P. A. Martin, Europhys.Lett. **72**, 42 (2005).
- [77] G. Bimonte, Phys.Rev.A **79**, 042107 (2009).
- [78] M.Antezza, L.P.Pitaevskii and S.Stringari, Phys.Rev.A 70, 053619 (2004).
- [79] M.Antezza, L.P.Pitaevskii and S.Stringari, Phys.Rev.Lett. 95, 113202 (2005).

- [80] Slonczewski, J. C.; Weiss, P. R. Physical Review **109** 272 (1958)
- [81] Y. Zhang, et al., Phys. Rev. Lett. 96, 136806 (2006).
- [82] D.A. Abanin, et al., Phys. Rev. Lett. 98, 196806 (2007).
- [83] Z. Jiang, et al., Phys. Rev. Lett. 98, 197403 (2007).
- [84] T. W. Appelquist, M. J. Bowick, D. Karabali and L. C. R. Wijewardhana, Phys. Rev. D 33, 3704 (1986).
- [85] P.R. Wallace, Phys. Rev. 77, 622 (1947).
- [86] A. N. Redlich, Phys. Rev. D 29 (1984) 2366; Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 18.
- [87] G. V. Dunne, K. M. Lee and C. h. Lu, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 3434 [arXiv:hep-th/9612194].
  - S. Deser, L. Griguolo and D. Seminara, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1976 [arXiv:hep-th/9705052].
  - C. Fosco, G. L. Rossini and F. A. Schaposnik, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 1980 [Erratum-ibid. 79 (1997) 4296] [arXiv:hep-th/9705124].
- [88] G. V. Dunne, "Aspects of Chern-Simons theory," arXiv:hep-th/9902115.
- [89] J. M. Dawlaty, et al., Appl. Phys. Lett. 93 (2008) 131905. Z. Q. Li, et al., Nat. Phys. 4 (2008) 532.
- [90] V. Zeitlin, Phys. Lett. B **352** (1995) 422-427.
- [91] A. B. Kuzmenko, private communication.
- [92] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Wiley; 3 edition (August 10, 1998)
- [93] S. Latil and L. Henrard Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 036803.
- [94] A. Chodos, K. Everding and D. A. Owen, Phys. Rev. D 42, 2881 (1990).
- [95] R. E. Prange, The Quantum Hall Effect, edited by R. E. Prange and S. M. Girvin, Springer-Verlag, New York, 1987.
- [96] T. Champel and V. P. Mineev, Phys. Rev. B 66, 195111 (2002); 67, 089901(E) (2003).
- [97] N. Dorey, N. E. Mavromatos Nucl. Phys. B **386**, 614 (1992).
- [98] Wei Li and Guo-Zhu Liu, Phys. Rev. D 81, 045006 (2010).
- [99] N. M. R. Peres, F. Guinea and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B 73, 125411 (2006).
- [100] C. G. Beneventano and E. M. Santangelo, J. Phys. A A39, 7457-7470 (2006).
- [101] C. G. Beneventano, P. Giacconi, E. M. Santangelo and R. Soldati, J. Phys. A A42, 275401 (2009).

- [102] A. J. Niemi, G. W. Semenoff, Theory Actions in Odd Dimensional Space-Times," Phys. Rev. Lett. 51, 2077 (1983).
- [103] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn and E. Rotenberg, Nat. Phys. 3, 36 (2007).
- [104] P. Neugebauer, M. Orlita, C. Faugeras, A.-L. Barra, and M. Potemski, Phys. Rev. Lett. 103, 136403 (2009), [arXiv:0903.1612v2]
- [105] C. G. Beneventano, P. Giacconi, E. M. Santangelo and R. Soldati, J. Phys. A **40** (2007) F435 [arXiv:hep-th/0701095];
  - C. G. Beneventano and E. M. Santangelo, J. Phys. A **41** (2008) 164035 [arXiv:0710.4928 [hep-th]];
  - C. G. Beneventano, P. Giacconi, E. M. Santangelo and R. Soldati, arXiv:0901.0396 [hep-th].
- [106] M. Bordag, D. Robaschik and E. Wieczorek, Annals Phys. 165, 192 (1985);
- [107] D. Robaschik, K. Scharnhorst, and E. Wieczorek, Annals Phys. 174, 401 (1987);
- [108] M. Bordag and J. Lindig, Phys. Rev. D 58, 045003 (1998) [arXiv:hep-th/9801129];
- [109] M. Bordag and K. Scharnhorst, Phys. Rev. Lett. 81, 3815 (1998) [arXiv:hep-th/9807121].
- [110] M. Bordag, I. G. Pirozhenko and V. V. Nesterenko, J. Phys. A 38, 11027 (2005) [arXiv:hep-th/0508198];
- [111] D. V. Vassilevich, Phys. Rev. D 79, 065016 (2009) [arXiv:0901.0337 [hep-th]].
- [112] A. Lambrecht and V. N. Marachevsky, Phys.Rev.Lett. 101, 160403 (2008); Int.J.Mod.Phys. A 24, 1789 (2009).
- [113] N.P. Landsman and Ch.G. van Weert, Physics Reports 145, Nos. 3 & 4 (1987) 141-249.
- [114] P. Ramond, Field Theory. A Modern Primer, Front. Phys. 51:1-397, 1981.