



Instituto de Física - INFIS  
Bacharelado em Física de Materiais

# **Isolantes Topológicos: Nanofitas de Siliceno Sob Campo Elétrico**

FELIPE AMORIM BORHER

Uberlândia - MG, 2019

FELIPE AMORIM BORHER

# Isolantes Topológicos

Nanofitas de Siliceno Sob Campo Elétrico

Monografia apresentada ao curso de Física de Materiais do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito para a obtenção do grau de Bacharel em Física de Materiais

Orientador      George Balster Martins

Dezembro de 2019

Felipe Amorim Borher

Isolantes Topológicos/ Felipe Amorim Borher. – Uberlândia, Minas Gerais-  
75p. : il. (algumas cor.) ; 30 cm.

Orientador George Balster Martins

Trabalho de Conclusão de Curso – UFU, Dezembro de 2019.

1. Isolante topológico. 2. Siliceno. 3. Grafeno. I. George Balster Martins. II. Universidade Federal de Uberlândia. III. Faculdade de física de materiais. IV. Isolantes Topológicos: Nanofitas de siliceno sob campo elétrico.

INFIS - Instituto de Física  
Universidade Federal de Uberlândia

Trabalho de Conclusão de Curso de Bacharelado em Física de Materiais intitulado **Isolantes Topológicos** de autoria de Felipe Amorim Borher, aprovada pela banca examinadora constituída pelos seguintes professores:

---

George Balster Martins  
Orientador

---

Gerson Ferreira Junior  
Instituto de Física - INFIS

---

Raimundo Lora Serrano  
Instituto de Física - INFIS

Uberlândia, 18 de dezembro de 2019



## DEDICATÓRIA

Eu dedico este trabalho aos meus pais Luciano Borher e Gislaine Amorim, por terem sempre se sacrificado para me criar e por nunca deixarem de me motivar a enfrentar meus problemas, como também a seguir meu sonho de se tornar um físico, que sem eles não seria possível.

# AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Luciano Borher e Gislaine Amorim, por sempre estarem comigo quando mais preciso e ajudarem a me manter em um lugar tão longe de casa, como sempre vocês deram tudo de vocês para me ajudar, isso é algo que irei lembrar pelo resto da minha vida, obrigado do fundo meu coração.

Agradeço aos meus avós, que sempre me recebiam calorosamente, procurando o seu “Ruy Barbosa”, obrigado por sempre se importarem tanto comigo mesmo estando longe.

Agradeço aos meus irmãos Gabriel Amorim Borher e Guilherme Amorim Borher, por serem parceiros incríveis, alegrando sempre minhas curtas férias em casa, vocês fazem muita diferença em minha vida.

Agradeço aos meus amigos Osvaldo Ferreira, Marcelo Rezende e Saula Cecília, pelas incontáveis discussões sobre problemas de física e problemas da vida. Nunca irei esquecer o tempo que passamos conversando e os conselhos recebidos, eu admiro muito vocês, vocês moram no meu coração.

Agradeço ao meu orientador George Balster Martins, que mesmo puxando muito minha orelha, me orientou da maneira mais incrível possível, sou muito grato ao senhor e a sua paciência admirável.

Agradeço aos meus colegas e professores do curso, graças a vocês eu aprendi muita coisa para levar pelo resto da vida, tanto quanto em nível acadêmico como coisas simplórias do dia a dia, obrigado, vocês me ensinaram muito.

Agradeço aos meus amigos que estão distantes no momento, obrigado por sempre estarem torcendo pelo meu melhor e por me ouvirem quando choro as pitangas ao voltar pra casa.

*“Remember to look up at the stars and not down at your feet. Try to make sense of what you see and wonder about what makes the universe exist. Be curious. And however difficult life may seem, there is always something you can do and succeed at. It matters that you don’t just give up.”* — Stephen Hawking

# RESUMO

Nesta monografia buscou-se compreender como funcionam os isolantes topológicos, uma classe de material que apresenta propriedades físicas intrigantes e não-triviais. A estrutura da monografia segue uma introdução sobre os assuntos que motivaram o descobrimento dos isolantes topológicos, através de um levantamento histórico partindo do efeito Hall e abordando conceitos básicos sobre física de estado sólido. É contido também o alvo do trabalho desta monografia, em que estudamos os materiais como o grafeno e o siliceno. Por fim temos também o estudo da transição de fase quântica por meio de fenômenos críticos, onde é feita a análise da estrutura de banda de nano-fitas *zig-zag* de siliceno sob campo elétrico através de simulações computacionais.

**Palavras-chave:** Isolante topológico; Siliceno; Grafeno.

# ABSTRACT

This monograph sought to understand how topological insulators behave, a class of material that has intriguing and nontrivial physical properties. The structure of the monograph follows an introduction to the subjects that motivated the discovery of topological insulators, through a historical survey based on the Hall effect and addressing basic concepts of solid state physics. It is also contained the main subject of the work of this monograph, in which we study materials such as graphene and silicene. Finally we have the study of the quantum phase transition through critical phenomena, where the analysis of the *zig-zag* nano-ribbon band structure under an electric field through computational simulations is performed.

**Key-words:** Topological insulator; Graphene; Silicene.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Representação gráfica do Efeito Hall. . . . .	15
Figura 1.2 – Representação gráfica do Efeito Hall Anômalo. . . . .	17
Figura 1.3 – Colisões dos portadores de carga descrita por Drude. . . . .	18
Figura 1.4 – Representação gráfica do Efeito Spin Hall. . . . .	20
Figura 1.5 – Representação gráfica do Efeito Hall Quântico. . . . .	21
Figura 1.6 – Comparação da resistividade entre o efeito Hall clássico e o quântico. . . . .	22
Figura 1.7 – Representação gráfica do Efeito Hall Quântico Anômalo. . . . .	23
Figura 1.8 – Representação gráfica do Efeito Spin Hall Quântico. . . . .	24
Figura 1.9 – Diferença entre estruturas: (a-cristal),(b-amorfo) e (c-policristal). . . . .	25
Figura 1.10–Cristal de rede cúbica e sua célula unitária. . . . .	26
Figura 1.11–Estrutura cristalina do tipo <i>honeycomb</i> . . . . .	27
Figura 1.12–Representação da periodicidade de $\{\mathbf{G}\}$ . . . . .	29
Figura 1.13–A rede de Bravais da rede hexagonal e seu respectivo espaço recíproco. . . . .	30
Figura 1.14–Zona de Brillouin de uma rede quadrada e triangular. . . . .	30
Figura 1.15–Os pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ da 1° ZB da rede hexagonal . . . . .	31
Figura 1.16–O potencial periódico da rede. . . . .	32
Figura 1.17–O comportamento da função de onda de acordo com Bloch. . . . .	33
Figura 1.18–Ordenamento das funções de onda dos elétrons em uma rede 1D. . . . .	34
Figura 1.19–Parâmetro de <i>hopping</i> do elétron . . . . .	35
Figura 1.20–Relação de dispersão das energias da rede linear monoatômica . . . . .	37
Figura 1.21–Exemplo de quebra de simetria de reversão temporal. . . . .	38
Figura 1.22–Reversão temporal na presença de um campo $B$ externo. . . . .	39
Figura 1.23–Exemplo de simetria de paridade. . . . .	43
Figura 1.24–Exemplo de envolvendo a função de onda e paridade. . . . .	45
Figura 2.1 – IT's 2D e 3D e suas respectivas dispersões de energia . . . . .	46
Figura 2.2 – Processo de deformação de um cubo para um paralelepípedo. . . . .	47
Figura 2.3 – Estrutura tipo monocamada do Grafeno. . . . .	49
Figura 2.4 – Espectro de energia do Grafeno. . . . .	50
Figura 2.5 – Cones de Dirac nos pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ nas bandas de condução e valência. . . . .	50
Figura 2.6 – Esquema da interação spin-órbita do átomo de hidrogênio. . . . .	51
Figura 2.7 – Estrutura da rede do siliceno. . . . .	54
Figura 2.8 – Esquema de uma nano-fita <i>zig-zag</i> . . . . .	55
Figura 2.9 – Espectro de energia da nano-fita <i>zig-zag</i> de grafeno. . . . .	56
Figura 2.10–Espectro de energia da nano-fita <i>zig-zag</i> de siliceno. . . . .	56
Figura 2.11–Espectro da nano-fita <i>zig-zag</i> de siliceno com a presença de um campo $E_z$ . . . . .	57
Figura 2.12–Transição do isolante não trivial para um trivial. . . . .	57

Figura 2.13–Domínio onde temos um comportamento trivial e não trivial. . . . .	59
Figura 3.1 – Exemplo de transições sólido para líquido, líquido para gasoso. . . . .	60
Figura 3.2 – Diagrama de fase de uma transição de fase quântica. . . . .	61
Figura 3.3 – Exemplo sobre o que é o comprimento de correlação $\xi$ . . . . .	63
Figura 3.4 – Plotagem dos coeficientes $c_{i\alpha\beta}$ do siliceno para $\lambda_{SO} = 0.2$ e $E_z = 0$ . . .	64
Figura 4.1 – O comportamento dos estados de borda quando $\xi \rightarrow \infty$ . . . . .	65
Figura 4.2 – Comprimento de penetração $\xi$ dos estados de borda com energia zero como função da distância ao ponto crítico $g = E - E_c$ . . . . .	66

# LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

INFIS	Instituto de Física
UFU	Universidade Federal de Uberlândia
EH	Efeito Hall
EHA	Efeito Hall Anômalo
ESH	Efeito Spin Hall
EHQ	Efeito Hall Quântico
EHQA	Efeito Hall Quântico Anômalo
ESHQ	Efeito Spin Hall Quântico
IT	Isolante Topológico
PO	Parâmetro de ordem
TFQ	Transição de fase Quântica
PCQ	Ponto crítico quântico
SO	Spin-órbita
RT	Reversão temporal
ZB	Zona de Brillouin



# SUMÁRIO

<b>Lista de Figuras</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>1 INTRODUÇÃO TEÓRICA</b> . . . . .	<b>15</b>
1.1 Efeito Hall Clássico . . . . .	15
1.1.1 Efeito Hall Anômalo . . . . .	16
1.1.2 O modelo de Drude . . . . .	17
1.1.3 Efeito Spin Hall . . . . .	19
1.1.4 Efeito Hall Quântico . . . . .	20
1.1.5 Modelo de Halldane . . . . .	22
1.1.6 Efeito Spin Hall Quântico . . . . .	23
1.2 Estrutura Cristalina . . . . .	24
1.2.1 Simetria de Translação e Célula Unitária . . . . .	25
1.2.2 Rede Recíproca . . . . .	27
1.2.3 Zona de Brillouin . . . . .	30
1.3 Equação de Schrödinger em potenciais periódicos . . . . .	31
1.3.1 Teorema de Bloch . . . . .	32
1.3.2 Método Tight-Binding . . . . .	33
1.4 Simetria de reversão temporal . . . . .	38
1.4.1 Reversão temporal em sistemas clássicos . . . . .	39
1.4.2 Reversão temporal em mecânica quântica . . . . .	40
1.5 Simetria de paridade . . . . .	42
1.5.1 Paridade em mecânica clássica. . . . .	43
1.5.2 Paridade em mecânica quântica . . . . .	43
<b>2 Isolantes topológicos</b> . . . . .	<b>46</b>
2.1 Invariante topológico . . . . .	47
2.2 Grafeno . . . . .	48
2.3 Efeito spin-órbita . . . . .	51
2.4 Siliceno . . . . .	53
2.5 Nano-fitas . . . . .	55
<b>3 Transições de fase</b> . . . . .	<b>60</b>
3.1 Fenômenos críticos . . . . .	62
<b>4 RESULTADOS</b> . . . . .	<b>65</b>
<b>5 CONCLUSÕES</b> . . . . .	<b>68</b>
<b>Referências</b> . . . . .	<b>69</b>
<b>APÊNDICE A Tight-Binding Grafeno</b> . . . . .	<b>73</b>

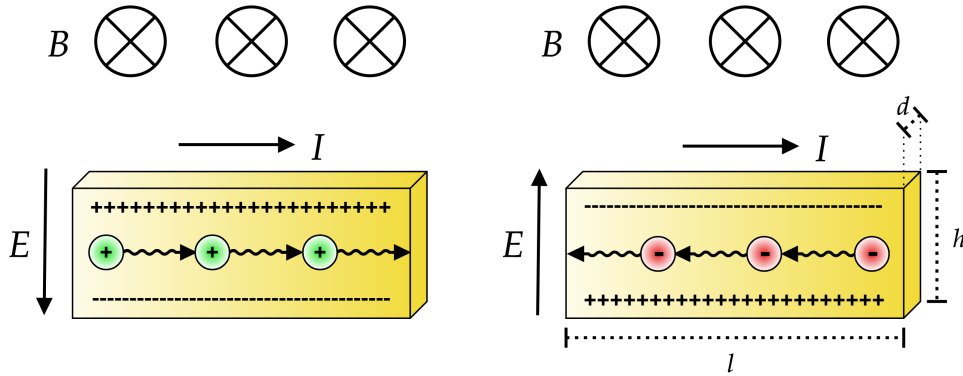
APÊNDICE B Cones de Dirac . . . . .	75
-------------------------------------	----

# 1 INTRODUÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo será apresentada uma introdução geral contemplando a área que abrange esta monografia, abordando uma contextualização histórica sobre as produções científicas relacionadas aos primórdios dos isolantes topológicos, como também o tratamento matemático e físico aplicados.

## 1.1 EFEITO HALL CLÁSSICO

No ano de 1897, o físico americano Edwin H. Hall realizou um experimento que até hoje carrega seu nome; o experimento consistiu de medir a voltagem que surge em sistemas em que as portadores de carga podem ser submetidos a um campo elétrico externo  $\mathbf{E}_{\text{ext}}$  e um campo magnético  $\mathbf{B}$  perpendicular à amostra [1]. No caso, Hall o fez em um sistema bidimensional. O interessante deste sistema é que, como a força de Lorentz prevê, partículas carregadas tem sua trajetória desviada e acabam se acumulando nas bordas do sistema, veja a figura (1.1), gerando um campo elétrico  $\mathbf{E}$ , bem como uma diferença de potencial entre as bordas da placa, a qual pode ser medida.



**Figura 1.1** – Representação gráfica do Efeito Hall.

Quando em equilíbrio, temos que a força de Lorentz sobre a partícula carregada é nula:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = 0, \quad (1.1)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade das partículas e  $q$  a carga. A diferença de potencial entre as bordas no equilíbrio é  $V_H = Eh$  e a corrente elétrica na placa é  $I = qn_p\nu h$ , em que o termo  $n_p$  é a densidade de portadores de carga no sistema. Através da razão da diferença de potencial

de Hall e a corrente, para um sistema ôhmico, é possível obter a expressão da resistência Hall:

$$\frac{V_H}{I} = R_H \longrightarrow R_H = \frac{E}{qn_p\nu} \text{ ou } R_H = \frac{B}{qn_p} = \frac{BV}{qN}, \quad (1.2)$$

onde a última expressão foi obtida pelo uso da equação (1.1), i.e,  $E = vB$  e  $n_p = N/V$  onde  $N$  é o número total de portadores de carga e  $V$  é o volume do sistema. Vemos portanto que a Resistência Hall é linear com o campo magnético aplicado. Contudo, vemos que:

$$R_H = \rho_H \frac{h}{A^*} \longrightarrow \rho_H = \frac{ld}{h} \frac{BV}{qN}. \quad (1.3)$$

Portanto a resistividade Hall também é linear com o campo magnético (o termo  $A^*$  refere-se à área de secção longitudinal da placa). Sabendo as dimensões do sistema, o valor do campo magnético aplicado, e medindo a voltagem Hall, podemos obter o sinal dos portadores de carga (elétrons ou buracos), bem como sua densidade  $n_p$ .

### 1.1.1 Efeito Hall Anômalo

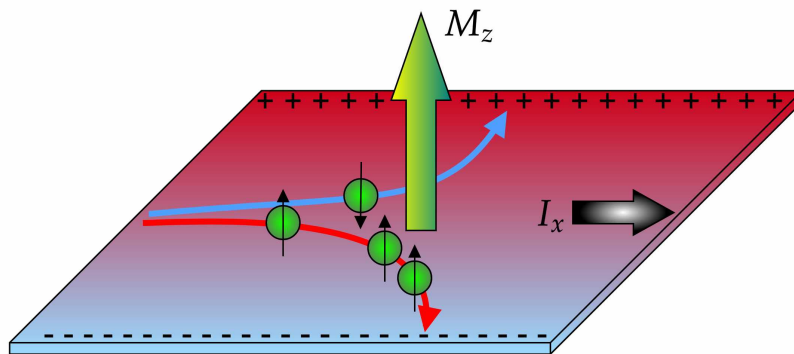
**Nota:** Esta subsecção não é de suma importância para compreender o foco da monografia, os isolantes topológicos, contudo, ela segue o intuito introdutório sobre a história do efeito Hall.

Após um ano da descoberta do efeito Hall (EH), em 1898 Hall realizou o mesmo experimento para materiais de caráter ferromagnético, observando que a resistência Hall apresentava uma contribuição além do termo linear no campo magnético [2]. Uma das propostas aceitas para compreender o efeito foi de que este termo era proporcional à magnetização  $\mathbf{M}$  em um metal ferromagnético, pois mesmo na ausência do campo magnético ainda havia efeito Hall, a relação empírica que se estabeleceu foi:

$$R_H = R_C \mathbf{B} + R_A \mathbf{M} \quad (1.4)$$

em que o primeiro termo remete à contribuição que depende do campo magnético e o segundo sendo a contribuição devido à magnetização do material. O intrigante dessa relação é que até então não era possível descrever a origem dessa contribuição apenas através da força de Lorentz aplicada aos portadores de carga. Aparentemente, a razão dessa contribuição está ligada à topologia das bandas dos sólidos [3, 4], porém a mesma não havia sido formulada na época. Uma teoria que age como um suplente, elaborada

em 1954 pelos físicos Robert Karplus e Joaquin Luttinger [5], descrevia que para este tipo de sistema, quando um campo elétrico era aplicado no sólido, os elétrons adquiriam uma nova velocidade de grupo, o que representa um termo “anômalo”. O interessante é que a velocidade anômala é perpendicular ao campo elétrico do sistema, podendo então contribuir para a condutividade Hall. A velocidade anômala agora está relacionada com a mudança de fase na função da onda de Bloch e o Hamiltoniano da rede, em que no momento que um campo elétrico é aplicado, há uma evolução do sistema no espaço  $\mathbf{k}$  da rede do cristal [6, 7].



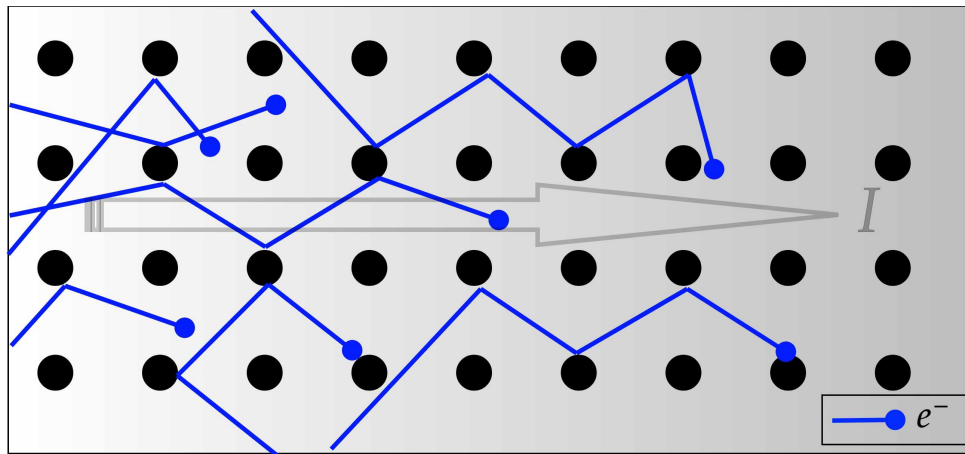
**Figura 1.2** – Representação gráfica do Efeito Hall Anômalo.

Em suma, podemos dizer que a origem do Efeito Hall Anômalo (EHA) tem características extrínsecas para cada material, podendo ser relacionada tanto quanto ao espalhamento dos portadores devido ao spin dos mesmos ou devido à natureza da sua banda de condução que depende dos spins dos portadores [4]. Esse tipo de efeito é relativístico e acontece devido ao acoplamento dos elétrons que se movem nos orbitais com seu spin. Quando temos elétrons que se movem sob ação de um campo elétrico externo, o elétron é submetido a uma força transversal, que é proporcional à sua corrente de spin, diferente da corrente de carga como vemos na força de Lorentz [8], deste modo, os elétrons com o spin-up e spin-down iram se mover para direções opostas no material. Tratando dos materiais ferromagnéticos, a contribuição devido à magnetização causa uma diferença na população dos elétrons, pois teremos uma preferência de spin, gerando então o efeito Hall anômalo .

### 1.1.2 O modelo de Drude

Para compreender melhor o efeito Hall clássico, é interessante compreender um modelo mais elaborado para descrever a dinâmica do elétron, o modelo proposto em 1900 pelo físico Paul Drude [9], no qual assumimos que os portadores de carga estão em um meio que oferece uma resistência. A resistência que o modelo descreve é devida ao espalhamento

entre os portadores de cargas e as impurezas da amostra e também entre os portadores de carga e as vibrações dos átomos do material, como visto na figura (1.3), isso implica que, apesar das cargas entrarem em movimento sob a força de Lorentz, elas perdem energia devido as colisões.



**Figura 1.3** – Colisões dos portadores de carga descrita por Drude.

Se considerarmos que o tempo médio entre as colisões no sistema é  $\tau$ , temos então a média das forças que agem contra o sentido dos portadores:

$$\mathbf{F}_{ret} = -\frac{m\mathbf{v}}{\tau}. \quad (1.5)$$

onde os termos  $m$  e  $\mathbf{v}$  são a massa e a velocidade média dos portadores. Levando em conta a força de Lorentz no sistema, a segunda lei de Newton implica que:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{m\mathbf{v}}{\tau}. \quad (1.6)$$

Para o caso em equilíbrio, as forças se anulam, logo  $\dot{\mathbf{v}}$  é zero, em que obtemos:

$$\frac{m\mathbf{v}}{\tau} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (1.7)$$

Tomando  $\mathbf{B}$  ao longo do eixo  $z$ , temos as seguintes componentes cartesianas:

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{q\tau}{m} E_x + \frac{q\tau}{m} B v_y \\ v_y &= \frac{q\tau}{m} E_y - \frac{q\tau}{m} B v_x \\ v_z &= \frac{q\tau}{m} E_z \end{aligned} \quad (1.8)$$

Vamos usar neste exemplo uma amostra com as dimensões físicas da figura (1.1), em que

podemos definir as correntes do sistema como:

$$\begin{aligned} I_x &= J_x hd = Nqv_x(hd) \longrightarrow J_x = Nqv_x \\ I_y &= J_y ld = Nqv_y(ld) \longrightarrow J_y = Nqv_y \\ I_z &= J_z lh = Nqv_z(lh) \longrightarrow J_z = Nqv_z \end{aligned} \quad (1.9)$$

obtendo, portanto:

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{\sigma}{1 + (\omega_c \tau)^2} (E_x + \omega_c \tau E_y) \\ J_y &= \frac{\sigma}{1 + (\omega_c \tau)^2} (E_y - \omega_c \tau E_x) \\ J_z &= \sigma E_z \end{aligned} \quad (1.10)$$

em que :

$$\sigma \equiv \frac{Nq^2 \tau}{m} \text{ e } \omega_c \equiv \frac{qB}{m}. \quad (1.11)$$

Agora temos que a expressão para a condutividade  $\sigma$  depende de um parâmetro  $\tau$ , aqui o interpretamos como um tempo de relaxação, conceito muito usado para discutir transporte eletrônico em materiais. O termo  $\omega_c$  representa a frequência de ciclotron dos portadores de carga. Considerando o caso onde a contribuição do campo  $E_z$  é nula ( $E_z = 0$ ) e que a contribuição espacial da placa ao longo do eixo  $z$  é desprezível ( $d \rightarrow 0$ ), sabendo que  $\mathbf{E} = \rho \mathbf{J}$ , podemos descrever a resistividade como:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{m}{Nq^2 \tau} \text{ e } \rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B_z}{Nq} \quad (1.12)$$

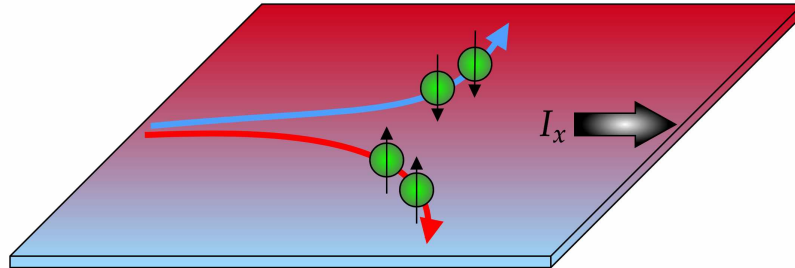
aqui conseguimos descrever que a resistividade é um parâmetro que depende da direção, em que apenas os termos transversais tem uma relação linear com o campo magnético aplicado.

### 1.1.3 Efeito Spin Hall

**Nota:** Esta subseção não é de suma importância para compreender o foco da monografia, os isolantes topológicos, contudo, ela segue o intuito introdutório sobre a história do efeito Hall.

Em 1971, os físicos Dyakonov e Perel propuseram um modelo análogo do EH, más com spins [10, 11]. Diferente do EHA, não há contribuição da magnetização do material ou campo magnético externo. A premissa do modelo parte das observações de que, na

ausência desses elementos, ainda podemos observar efeitos em sólidos como o espalhamento dos elétrons devido a sua orientação de spin, como visto na figura (1.4).



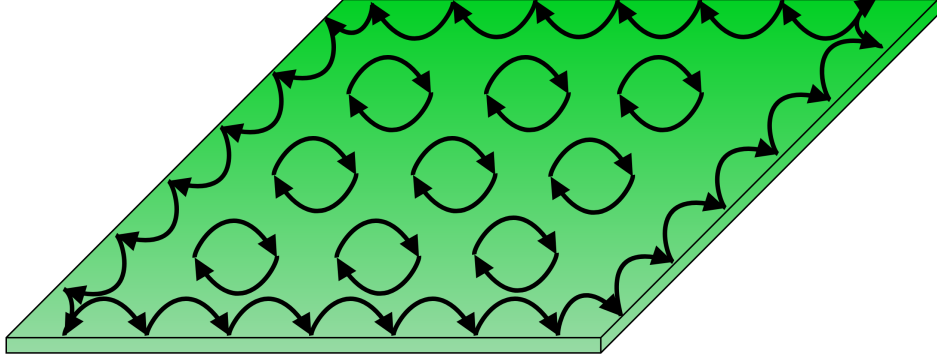
**Figura 1.4** – Representação gráfica do Efeito Spin Hall.

Neste modelo, ao passar uma corrente na amostra, há um acumulo de spins nas bordas, sendo a orientação de spin opostas em relação à outra borda do material, como também, se a corrente induzida for invertida, a orientação dos spins também inverte. A princípio, era pensado que o acumulo de spins nas bordas era devido ao espalhamento assimétrico entre os elétrons de spin-up e spin-down com impurezas da amostra, de modo que a origem do efeito era extrínseca [12], porém, em 2003 foi demonstrado que o acoplamento spin órbita pode produzir a corrente de spin transversal mesmo sem espalhamento ocasionado por impurezas [13, 14], agora colocando o efeito spin Hall (ESH) como de natureza intrínseca.

#### 1.1.4 Efeito Hall Quântico

Em 1980, após 83 anos da descoberta do EH, os físicos Klaus von Klitzing, G.Dorda e M. Pepper conseguiram observar experimentalmente um comportamento exótico da matéria [15]. Colocando um gás de elétrons 2D sob baixas temperaturas, da ordem de  $1.5K$  e um forte campo magnético (da ordem de  $15T$ ) perpendicular à amostra produz algo similar ao EH, temos que há uma corrente nas bordas do material. Quando os elétrons entram em seu movimento de órbita na presença do campo magnético externo, encontram uma barreira física nas bordas com o vácuo, então começam a caminhar em semi-circunferências através das bordas, já o meio do material se torna isolante, contendo elétrons com um movimento orbital, como vemos na figura (1.5).





**Figura 1.5** – Representação gráfica do Efeito Hall Quântico.

Diferente do efeito Hall clássico, este sistema apresenta o mínimo de dissipação e também um comportamento quantizado da condutância de Hall, assim como na equação (1.12), podemos descrever a condutividade da mesma forma, de modo que para o sistema em equilíbrio temos:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{\nu e^2}{\hbar} \\ \frac{-\nu e^2}{\hbar} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

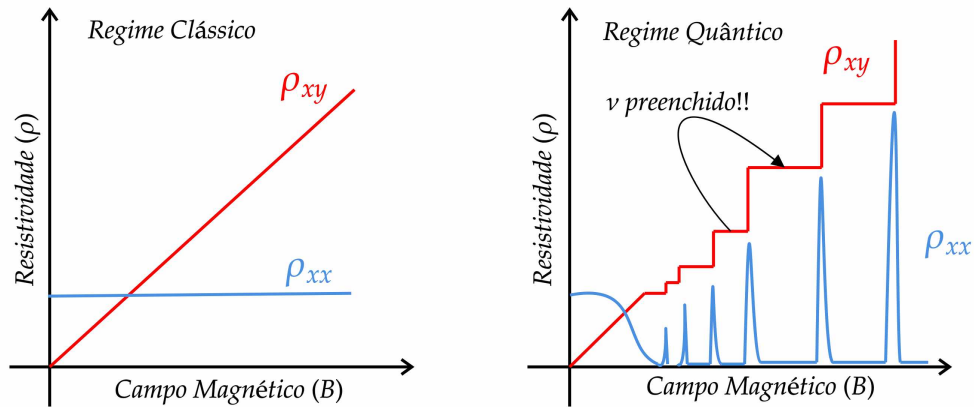
a condutividade transversal é nula quando não temos transições e o termo  $\nu$  representa um fator de preenchimento, podendo apenas conter números inteiros ( $\nu = 1, 2, 3, \dots$ ). Sabemos que a dinâmica orbital do elétron sob um campo magnético é equivalente ao oscilador harmônico quântico, em que as energias possíveis são quantizadas:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c, \quad \text{sendo } \omega_c = \frac{eB}{m} \quad (1.14)$$

Referente aos níveis de energia  $E_n$ , os mesmos são chamados de níveis de energia de Landau, esse tipo de comportamento só é notável para sistemas com baixas temperaturas e fortes campos magnéticos, isto é, quando a energia térmica é menor que os níveis de energia de Landau ( $k_B T \ll \hbar \omega_c$ ), tendo um degenerescência muito alta. Quando um desses níveis de energia é totalmente preenchido, nenhum elétron pode mais ocupar aquele estado, o fator de preenchimento é  $\nu = 1$ , implicando que demos um salto no valor da condutividade do material, como vemos na figura (1.6).

O termo  $\omega_c$ , assim como visto na equação (1.11) é a frequência de ciclotron, os elétrons submetidos à força de Lorentz giram ao redor do fluxo magnético que passa no material, o interessante é que até mesmo as órbitas que descrevem seu movimento são quantizadas, de modo que a expressão para o raio das mesmas é:

$$R_n = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}(2n+1)} \longrightarrow \omega_c R_n = \sqrt{\frac{eB\hbar}{m^2}(2n+1)}. \quad (1.15)$$



**Figura 1.6** – Comparação da resistividade entre o efeito Hall clássico e o quântico.

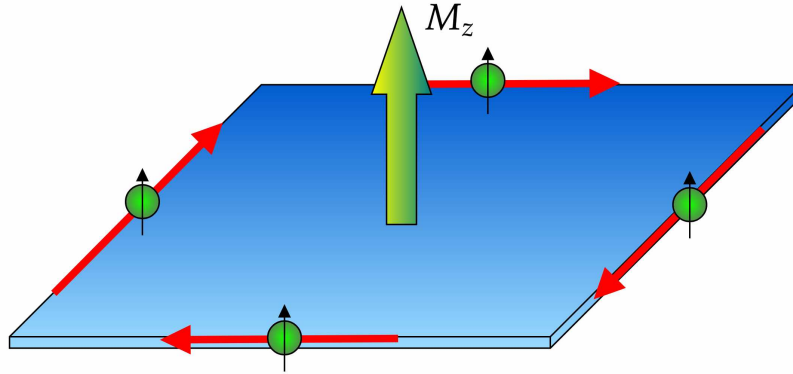
O interessante da equação (1.15) é que, podemos observar uma relação direta com o transporte de carga nas bordas, como visto na figura (1.5). É intuitivo pensar que quanto maior o  $R_n$ , mais rápido será o transporte, pois o salto dos elétrons é maior, implicando que quanto maior o nível de energia mais eficiente é o transporte, porém  $\omega_c$  pode ser um termo controlável experimentalmente, podemos aumentar os níveis de energia fornecendo energia para os elétrons como também aumentando o valor do campo magnético no sistema. Deste modo, podemos também aumentar a energia do sistema porém diminuindo as órbitas dos elétrons, o que nos leva a pensar que o transporte pode ser prejudicado. Entretanto, como visto na equação (1.14), a frequência  $\omega_c$  cresce linearmente com  $B$ , compensando a diminuição do salto de energia, logo a eficiência que o experimentador pode procurar depende como ele altera a energia do sistema.

Em suma, Klaus von Klitzing recebeu um Nobel em 1985 pela sua descoberta. O efeito Hall quântico (EHQ), foi o primeiro sistema a apresentar natureza topológica em física da matéria condensada, pois temos elétrons localizados no bulk (o sistema é isolante) e elétrons de condução nas bordas, sendo algo topologicamente característico [16]. Posteriormente foi descoberto que o termo  $\nu$  é um invariante topológico, cujo valor é independente das interações com os elétrons ou a geometria do sistema [17].

### 1.1.5 Modelo de Haldane

Em 1988, Haldane propôs um modelo com as mesmas características do EHQ, usando uma rede com "*Spinless fermions*" (elétrons sem spin) sob influência de um fluxo magnético periódico [18], seu intuito era demonstrar que poderíamos obter estados de borda sem trabalhar com condições extremas e as vezes não muito práticas como no EHQ. Com isso temos que o fluxo magnético total em uma célula unitária é zero, porém os elétrons são induzidos a formarem estados de condução nas bordas, como vemos na figura

(1. 7). Diferente do EHQ, neste sistema temos que a condutância de Hall é originada da estrutura de bandas dos elétrons da rede e não dos níveis discretos de Landau para um sistema com campo magnético grande, tendo então um modelo que descreve um caso particular do efeito Hall quântico anômalo (EHQA), sem a presença de campo externo líquido e os níveis de Landau.



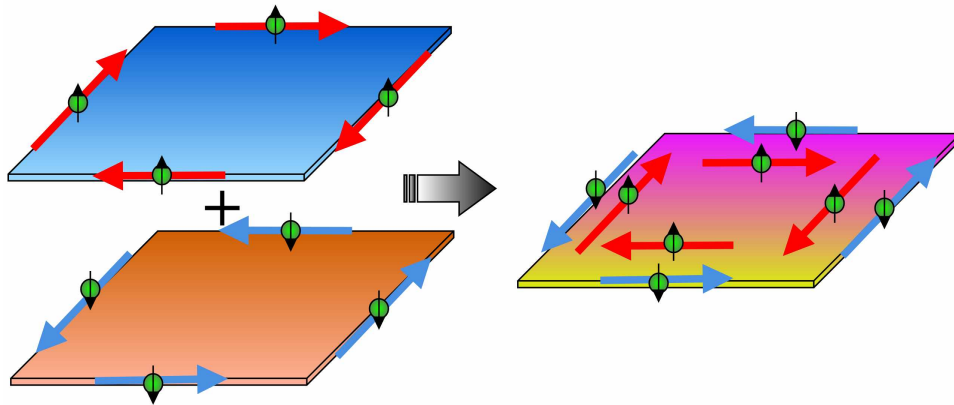
**Figura 1.7** – Representação gráfica do Efeito Hall Quântico Anômalo.

Após um estudo contínuo neste sistema, foi descoberto que o mesmo sistema poderia ser feito na ausência de um fluxo de campo magnético, incluindo apenas o acoplamento spin-órbita do elétron, o interessante é que temos que o EHQA é presente em materiais com acoplamento spin-órbita forte. Neste sistema, podemos descrever a condutância anômala por meio da integral de curvatura de Berry sob espaço  $\mathbf{k}$  [19] ou também através do número de Chern em bandas ocupadas. O modelo prevê que é possível acharmos um número de Chern diferente de zero para as bandas dos elétrons na ausência do campo magnético. O EHQA foi observável em 2015, através de filmes finos dopados de Crômio(*Cr*), com quebra de simetria de reversão temporal, este um isolante topológico [20].

### 1.1.6 Efeito Spin Hall Quântico

O efeito spin Hall quântico pode ser descrito com ferramentas similares ao EHQA, porém, ao invés de observarmos correntes de spins com uma única orientação nas bordas, vemos um combinação que pode ser descrita como dois EHQA com elétrons com spin-up e spin-down com quiralidade oposta. A contribuição para a condutância de Hall nesse sistema depende agora da corrente de spins.

Em 2005, os físicos Charlie Kane e Eugene Mele elaboraram algo engenhoso, fazendo uma generalização do modelo de Haldane usado para o EHQA, aplicando em uma rede de grafeno contendo elétrons de spin  $\frac{1}{2}$ , substituindo o fluxo periódico do campo magnético pelo acoplamento spin-órbita [21].



**Figura 1.8** – Representação gráfica do Efeito Spin Hall Quântico.

Para os spins dos elétrons, é como sentirem um campo magnético que depende do próprio spin. Em elétrons de spin opostos, será uma força spin-órbita oposta, ou seja, a força devida ao efeito spin-órbita é transversal [8]. Com isso, o intuitivo é observar que o sistema é como um modelo bicamada de Haldane para elétrons de spin  $\frac{1}{2}$ . Neste caso, temos que as correntes de spin se manifestam nas bordas do material, sendo opostas entre si, formando estados helicoidais de borda. O mais interessante do efeito, é que a simetria de reversão temporal é preservada e os estados de borda são robustos frente à impurezas da amostra, pois "backscattering" é proibido, gerando transporte com mínima dissipação possível, ambas características da natureza topológica do material.

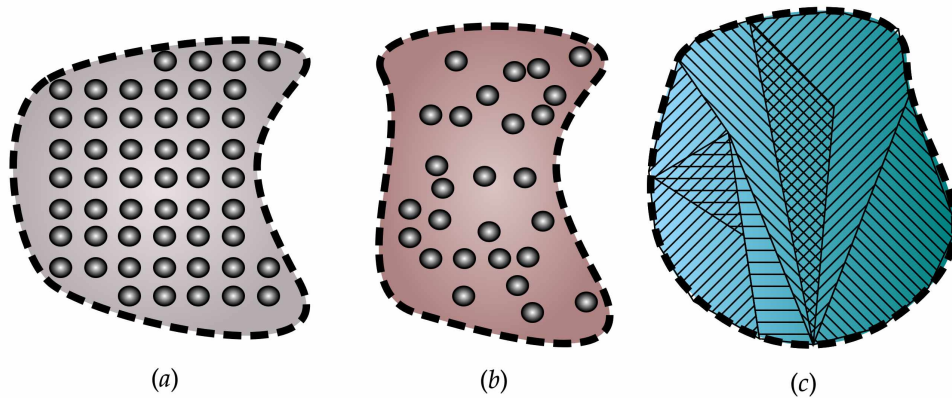
O trabalho de Kane e Mele causou uma grande agitação na comunidade de matéria condensada, pois o mesmo previa a existência dos isolantes topológicos de spin [22], visto que o ingrediente principal para observar transições topológicas era o efeito spin-órbita, houve um crescimento na pesquisa de novos materiais candidatos a serem ITs.

## 1.2 ESTRUTURA CRISTALINA

**Nota:** Esta seção é baseada em conceitos simples abordados em livros de física do estado sólido. Os livros textos usados como base podem ser vistos nas referências [23, 24].

Na física do estado sólido, procura-se compreender estruturas periódicas como os cristais e suas propriedades físicas. Como esses tipos de sistemas não apresentam desordem em sua rede, torna-se muito mais interessante para os físicos trabalharem com materiais cristalinos, note que isso é apenas uma das motivações. Apesar do senso comum, nem toda estrutura que assemelha-se a um material como o vidro comercial é um cristal, pois

o mesmo pode transparecer uma estrutura amorfa e não homogênea, a figura (1.9) pode exemplificar de maneira intuitiva. Como os elétrons possuem um comprimento de onda muito pequeno, da ordem da própria estrutura cristalina, qualquer mudança na estrutura e arranjo do material geram mudanças significativas em sua dinâmica. Já para a luz visível, seu comprimento de onda é suficientemente grande para não sofrer grandes alterações.



**Figura 1.9** – Diferença entre estruturas: (a-cristal),(b-amorfo) e (c-policristal).

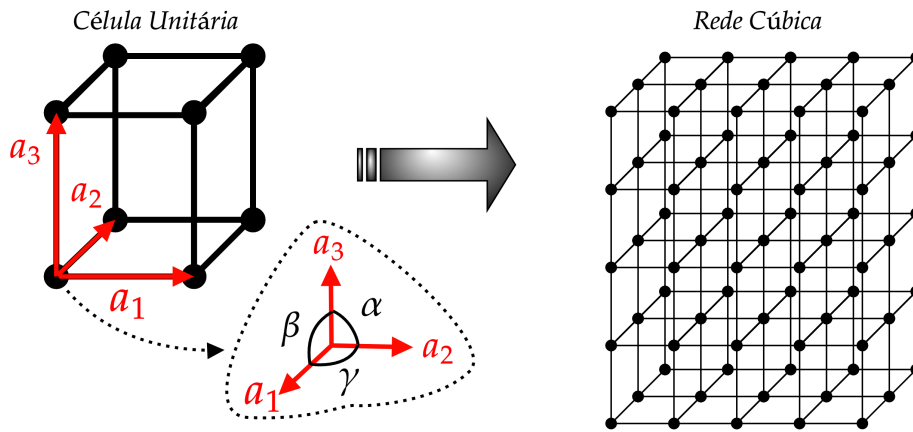
Há muitos materiais com estruturas cristalinas. Um conceito comum que é usado na área da cristalografia é que podemos definir uma estrutura como um cristal se o mesmo apresentar um arranjo de átomos em um padrão que se repete periodicamente em três dimensões. Essa definição implica a existência de simetria de translação e periodicidade espacial, isto é, se pudéssemos nos mover na rede por um vetor de rede, não notaríamos nenhuma mudança nas redondezas, pois pareceria que para onde nos deslocamos tudo é idêntico. Com isso podemos observar um padrão de repetição e obtermos uma base da rede cristalina.

### 1.2.1 Simetria de Translação e Célula Unitária

Para exemplificar o que apresentamos anteriormente, peguemos um arranjo 3D cúbico, e vamos colocar átomos em cada vértice. Essa estrutura periódica pode ser descrita através de um conjunto de vetores  $\{\mathbf{R}\}$  que pode se mover por toda estrutura cúbica, como na figura (1.10).

Podemos observar que todos os vértices da rede estão relacionados por uma translação na rede através de uma combinação linear dos vetores  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  (veja a equação 1.16). O notório dessa característica é que o sistema torna-se invariante perante qualquer deslocamento inteiro realizados pelos vetores, podendo então descrever qualquer posição na rede:

$$\mathbf{R} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3, \text{ sendo } m_i \text{ (} i = 1, 2, 3 \text{) um número inteiro.} \quad (1.16)$$



**Figura 1.10** – Cristal de rede cúbica e sua célula unitária.

O interessante é que com a equação (1.16), define-se a invariância translacional do cristal. Os termos  $m_i$  são números inteiros, pois contemplam a condição que um escalar inteiro dos vetores da célula unitária é suficiente para descrever toda posição possível na rede. Como visto na figura (1.10), entre os vetores da rede, podemos conter ângulos bem definidos, estes  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ . É importante mencionar que a rede cúbica é um caso particular onde os ângulos entre os vetores são todos iguais, ou seja,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , em que os vetores  $\vec{a}_i$  não são coplanares e são de mesma magnitude. O ângulo  $\alpha$  é entre os vetores  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$ ,  $\beta$  entre  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_3$  e  $\gamma$  entre  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , com base nisso, podemos descrever as seguintes combinações:

Vetores da base	Ângulos	Sistema cristalino
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	triclínico
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	monoclínico
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ortorrômico
$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tetragonal
$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	hexagonal
$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	romboédrico
$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	cúbico

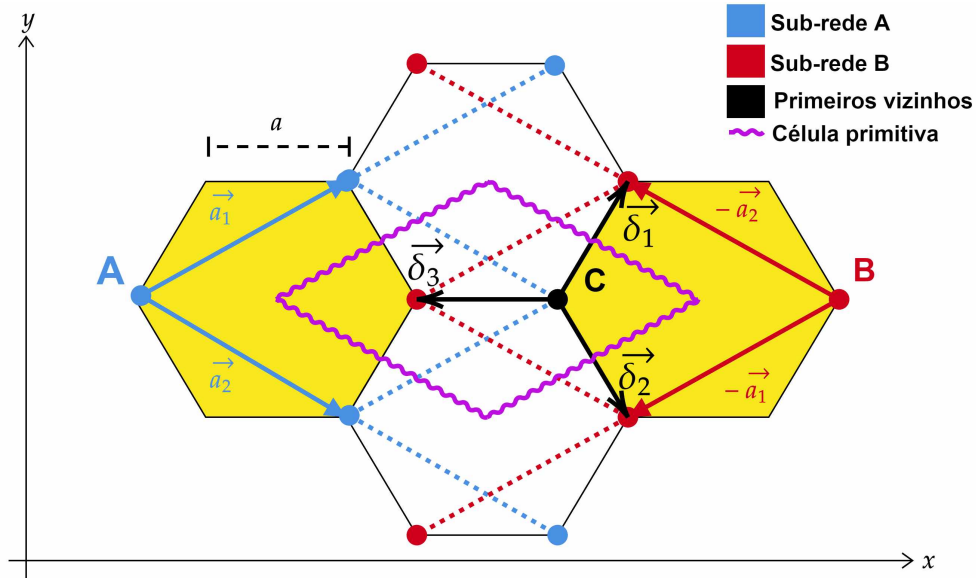
(1.17)

A célula unitária por sua vez será o elemento do cristal em que podemos estudar as propriedades físicas do material. É importante mencionar que:

- Não há uma única maneira de escolhermos o conjunto de vetores  $\vec{a}_i$ .
- Se os vetores que compõem o conjunto  $\vec{a}_i$  possuem o menor "passo" da rede e não são coplanares entre si, são denominados vetores primitivos.
- Define-se a célula unitária primitiva aquela que é constituída pelos vetores primitivos.
- Células unitárias primitivas possuem o menor volume possível, sendo  $V = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ .

- Em uma rede qualquer, existem inúmeras células primitivas possíveis, mas apenas uma célula de Wigner-Seitz.

O nome que damos para as redes que apresentam características periódicas, é rede de Bravais. Nesta monografia vamos trabalhar com a rede de geometria "Honeycomb" que contempla tanto a rede 2D que descreve o Grafeno quanto o Siliceno, porém estas não são redes de Bravais.



**Figura 1.11** – Estrutura cristalina do tipo *honeycomb*.

Como visto na figura (1.11), quando pegamos uma célula unitária hexagonal e expandimos em uma estrutura cristalina, precisamos de duas sub-redes triangulares para descrever toda rede real, no caso a sub rede A e B. Note que o argumento que faz que a rede hexagonal não seja uma rede de Bravais aparece quando observamos o ponto C, os pontos em que as vizinhanças parecem iguais em relação ao ponto C estão apenas contidos na sub rede A, separados da rede B por uma rotação de 180°, ou seja, a vizinhança que os pontos da sub rede A observam não são iguais ao pontos da sub rede B. Sua célula unitária primitiva, entretanto, contempla as características de uma base de uma rede de Bravais.

## 1.2.2 Rede Recíproca

A rede recíproca é onde trabalhamos com as propriedades do cristal no espaço  $\mathbf{k}$ , o espaço dos vetores de onda, sendo de grande importância para analisarmos fenômenos como difração de raios-X em sólidos cristalinos e o comportamento da estrutura eletrônica da rede. Vamos considerar uma rede de bravais 3D que podemos descrever com o seguinte conjunto de vetores:  $\{\mathbf{R}\}$ :

$$\mathbf{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \quad (1.18)$$

como já visto, sabemos que  $\mathbf{R}$  define o comportamento periódico da rede no espaço real, ou seja, existe uma operação de simetria que torna qualquer ponto descrito por  $\mathbf{R}$  invariante. Considerando uma onda plana 3D, que podemos descrever por  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , para um  $\mathbf{k}$  arbitrário, temos que a periodicidade dessa função de onda não será igual à rede de Bravais, logo podemos entender que a mesma não é invariante perante as mesmas operações de simetria. Vamos definir nossa rede recíproca como  $\mathbf{G}$ . Em um regime discreto, quando  $\mathbf{k} = \mathbf{G}$  teremos a mesma periodicidade, assim definimos que o conjunto de vetores  $\mathbf{G}$  define a nossa rede recíproca. Implicando que se aplicarmos uma translação para qualquer  $\mathbf{R}$ :

$$T_{\mathbf{R}}e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.19)$$

em outras palavras:

$$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1, \quad \therefore \mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n, \quad \text{sendo } (n = \text{inteiro}). \quad (1.20)$$

Com isso, podemos deduzir que toda rede de Bravais  $\{\mathbf{R}\}$  possui sua rede recíproca  $\{\mathbf{G}\}$  correspondente. É importante mencionar que a rede de Bravais será definida no espaço real, com uma dimensão  $[L]$ , enquanto sua rede recíproca será descrita no espaço dos vetores de onda, com dimensão  $[1/L]$ .

Podemos descrever um simples exemplo envolvendo uma rede linear (1D) com um parâmetro arbitrário de rede  $\mathbf{a}$ , neste caso, podemos descrever os pontos da rede como  $\mathbf{R} = m\mathbf{a}\hat{x}$ . Consideremos uma onda plana real  $\text{sen}(kx)$ , é fácil ver que apenas em valores discretos de  $k$  que a onda terá a mesma periodicidade da rede, usando a equação (1.20), obtemos a rede recíproca  $\{\mathbf{G}\}$  para uma dimensão, sendo como resultado  $\mathbf{G} = 2\pi n/a\hat{k}_x$ , implicando que o espaçamento periódico dos pontos da rede recíproca  $\{\mathbf{G}\}$  possui parâmetro de rede  $2\pi/a$  como visto na figura (1.12).

Uma das coisas que podemos provar sobre a rede de recíproca é que ela também é uma rede de Bravais. Usando a idéia que seus vetores primitivos  $\vec{\mathbf{b}}_1, \vec{\mathbf{b}}_2$  e  $\vec{\mathbf{b}}_3$  são construídos a partir dos vetores da rede de Bravais,  $\vec{\mathbf{a}}_1, \vec{\mathbf{a}}_2$  e  $\vec{\mathbf{a}}_3$ , obtemos:

$$\vec{\mathbf{b}}_1 = 2\pi \frac{\vec{\mathbf{a}}_2 \times \vec{\mathbf{a}}_3}{\vec{\mathbf{a}}_1 \cdot (\vec{\mathbf{a}}_2 \times \vec{\mathbf{a}}_3)}; \quad \vec{\mathbf{b}}_2 = 2\pi \frac{\vec{\mathbf{a}}_3 \times \vec{\mathbf{a}}_1}{\vec{\mathbf{a}}_1 \cdot (\vec{\mathbf{a}}_2 \times \vec{\mathbf{a}}_3)}; \quad \vec{\mathbf{b}}_3 = 2\pi \frac{\vec{\mathbf{a}}_1 \times \vec{\mathbf{a}}_2}{\vec{\mathbf{a}}_1 \cdot (\vec{\mathbf{a}}_2 \times \vec{\mathbf{a}}_3)}. \quad (1.21)$$

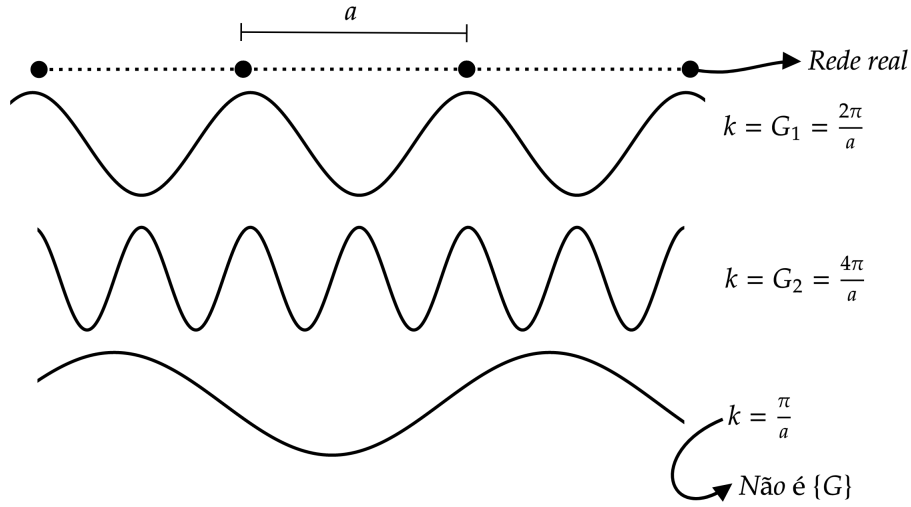
Com isso, queremos mostrar que a rede recíproca  $\mathbf{G} = n_1\vec{\mathbf{b}}_1 + n_2\vec{\mathbf{b}}_2 + n_3\vec{\mathbf{b}}_3$  satisfaz a condição na equação (1.20). Tendo como  $\{\mathbf{R}\}$  a equação (1.18), o produto escalar  $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}$  admite que:

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (1.22)$$

de modo que:

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3). \quad (1.23)$$





**Figura 1.12** – Representação da periodicidade de  $\{\mathbf{G}\}$ .

Note que ambos os índices  $n_i$  e  $m_i$  podem apenas assumir valores inteiros, logo sua soma também, demonstrando então a relação da equação (1.20). Em conclusão, a rede recíproca é uma rede de Bravais cujos vetores primitivos são os  $\vec{\mathbf{b}}_i$ .

Nosso desenvolvimento engloba a geometria *honeycomb*, como visto na figura (1.11). Para tratar o sistema como uma rede de Bravais, devemos usar sua célula primitiva. Sua estrutura pode ser descrita como uma rede triangular com a base de dois átomos por célula unitária. A expressão que temos para seus vetores primitivos 2D são:

$$\vec{\mathbf{a}}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \vec{\mathbf{a}}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}). \quad (1.24)$$

Para sabermos os vetores primitivos dessa rede, usamos a seguinte expressão:

$$\vec{\mathbf{b}}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_2}{\vec{\mathbf{a}}_1 \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_2}; \quad \vec{\mathbf{b}}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_1}{\vec{\mathbf{a}}_2 \cdot \mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_1}, \quad (1.25)$$

em que o termo  $\mathbf{R}$  representa uma matriz de rotação em  $90^\circ$ :

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \text{Cos}(\theta) & -\text{Sen}(\theta) \\ \text{Sen}(\theta) & \text{Cos}(\theta) \end{pmatrix} \xrightarrow{90^\circ} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

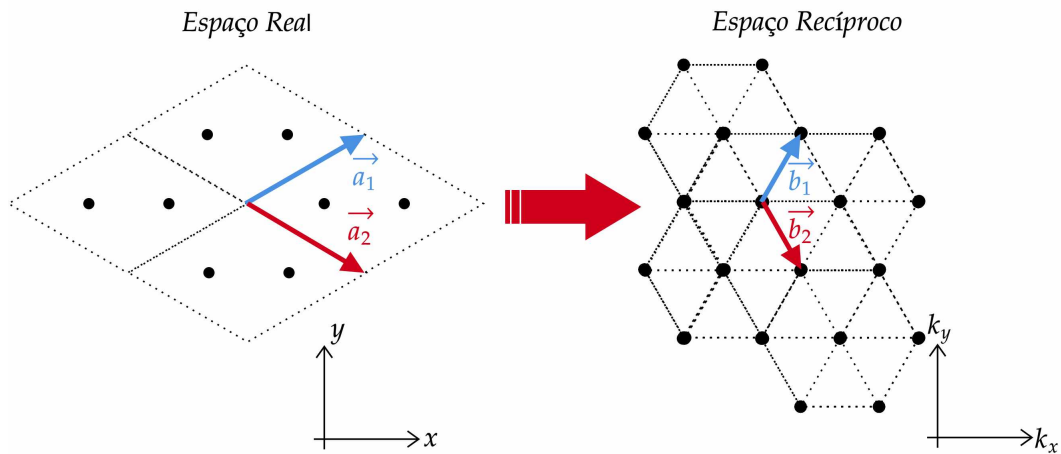
obtendo portanto:

$$\mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_1 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}, 3); \quad \mathbf{R} \cdot \vec{\mathbf{a}}_2 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, 3). \quad (1.27)$$

Resolvendo os vetores  $\vec{\mathbf{b}}_1$  e  $\vec{\mathbf{b}}_2$  na equação (1.25), a expressão para os vetores da rede recíproca se torna:

$$\vec{\mathbf{b}}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}); \quad \vec{\mathbf{b}}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (1.28)$$

Sabendo agora como é nossa rede recíproca  $\{\mathbf{G}\}$ , vamos observar espaço  $\mathbf{k}$  do nosso cristal na figura (1.13):

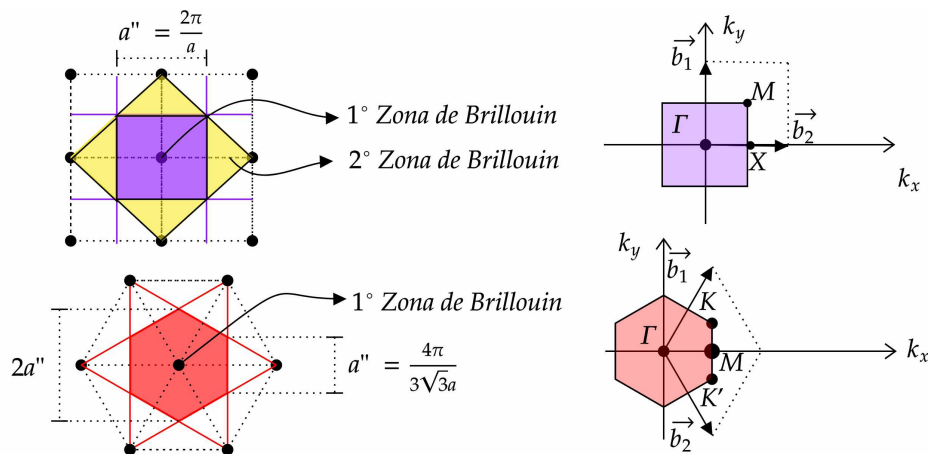


**Figura 1.13** – A rede de Bravais da rede hexagonal e seu respectivo espaço recíproco.

Como visto, em nosso espaço recíproco temos uma rede triangular, aqui estudaremos as propriedades eletrônicas da rede, no domínio da primeira zona de Brillouin.

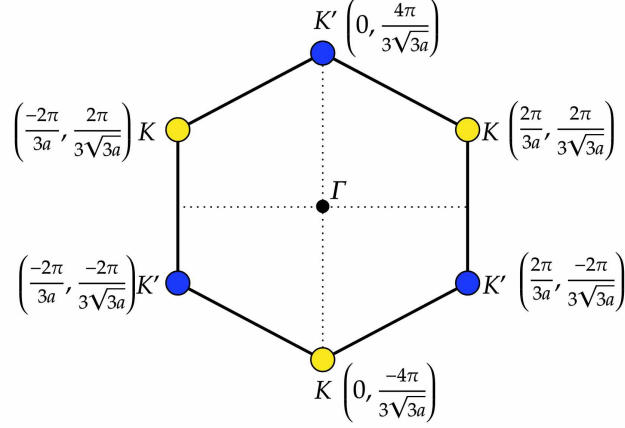
### 1.2.3 Zona de Brillouin

A zona de Brillouin (ZB) é descrita em física de estado sólido, como uma célula unitária primitiva da sua rede recíproca. A rede recíproca pode ser definida por um conjunto de ZB's. Para os físicos, é interessante trabalhar com a primeira ZB, pois esta é uma região sem desconexão (veremos o que isso significa na figura 1.14). Podemos denominar as ZB's através das regiões que as linhas bissetrizes perpendiculares entres os pontos mais próximos do ponto central geram quando se intersectam.



**Figura 1.14** – Zona de Brillouin de uma rede quadrada e triangular.

Os pontos  $\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{M}, \mathbf{X}$  e  $\mathbf{\Gamma}$  são conhecidos como pontos de alta simetria, em que temos mais pontos na célula unitária além do mesmo que se comportam de maneira igual. Vamos definir as coordenadas dos pontos  $K$  e  $K'$  da rede hexagonal da figura (1.14);



**Figura 1.15** – Os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  da 1° ZB da rede hexagonal

Nosso ponto de interesse engloba a ZB da rede hexagonal, pois a mesma contém a mesma geometria do Grafeno e do Siliceno e é fundamental para cálculos que engloba esta monografia. Em especial os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  são pontos em que observamos os chamados cones de Dirac, objeto de grande estudo quando estamos tratando dos Isolantes Topológicos, e serão de suma importância para o desenvolvimento desta monografia.

## 1.3 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM POTENCIAIS PERIÓDICOS

**Nota:** Esta seção é baseada em conceitos abordados em livros de estado sólido. Os livros textos usados como base podem ser vistos nas referências [23, 24].

Em sistemas microscópicos e não relativísticos, a dinâmica dos elétrons é muito bem descrita através da mecânica quântica. Em geral, por meio da equação de Schrödinger, sendo esta:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.29)$$

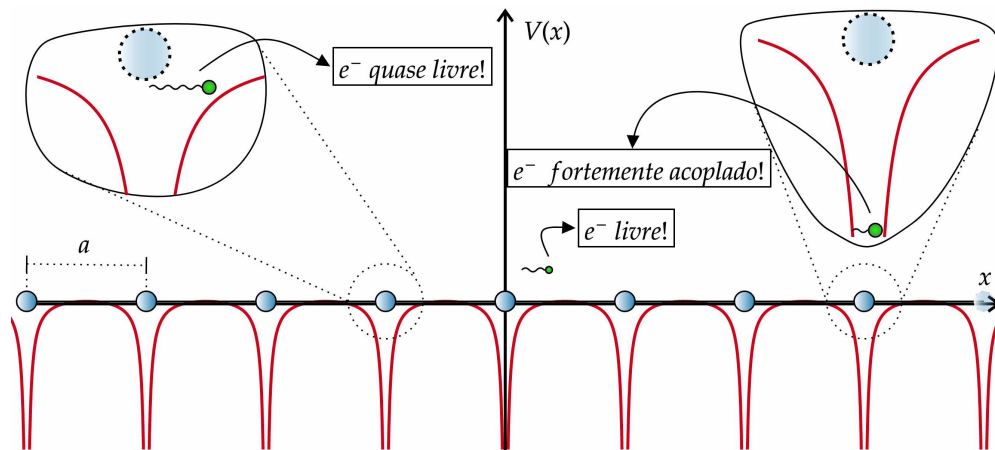
$\hat{H}$  é nosso operador Hamiltoniano que contém a informação da energia cinética e potencial do sistema. Através de uma separação de variáveis, podemos descrever  $\Psi(\vec{r}, t)$  como um produto de funções  $\psi(\vec{r}) T(t)$ , obtendo a equação de Schrödinger independente do tempo.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \longrightarrow \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (1.30)$$

A relação obtida na equação (1.30) implica que  $\psi(\vec{r})$  equivale à parte espacial dos autoestados de  $\hat{H}$ . Já  $E$  corresponde aos autovalores da equação (1.16), em que obtemos a informação das energias possíveis do sistema.

Vamos imaginar uma rede linear de átomos como segue a figura (1.30). Observamos que assim como a periodicidade espacial dos átomos em um cristal, os potenciais atratores dos núcleos atômicos possuem a mesma periodicidade, logo é intuitivo que:

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}), \quad \forall \vec{R} \in \text{Rede de Bravais} . \quad (1.31)$$



**Figura 1.16** – O potencial periódico da rede.

Como visto na figura (1.16), podemos ter diferentes estados ocupados para os elétrons na rede. Iremos tratar nesta seção do modelo Tight-Binding, em que temos orbitais atômicos razoavelmente localizados. Apesar de antigamente o método Tight-Binding ser visto como útil apenas para descrever materiais isolantes, ele também descreve materiais semicondutores como o siliceno e semi-metais como o grafeno, o foco desta monografia.

### 1.3.1 Teorema de Bloch

Quando estamos tratando de potenciais periódicos, o uso do teorema de Bloch é extremamente necessário. Estamos tratando da dinâmica dos elétrons em cristais. Vamos admitir que em nossos sistemas os elétrons não interagem entre si, sentindo apenas o potencial dos átomos da rede ou de campos externos aplicados ao sistema. Isso implica que podemos resolver os elétrons de forma independente, deste modo, a equação de Schrödinger se torna :

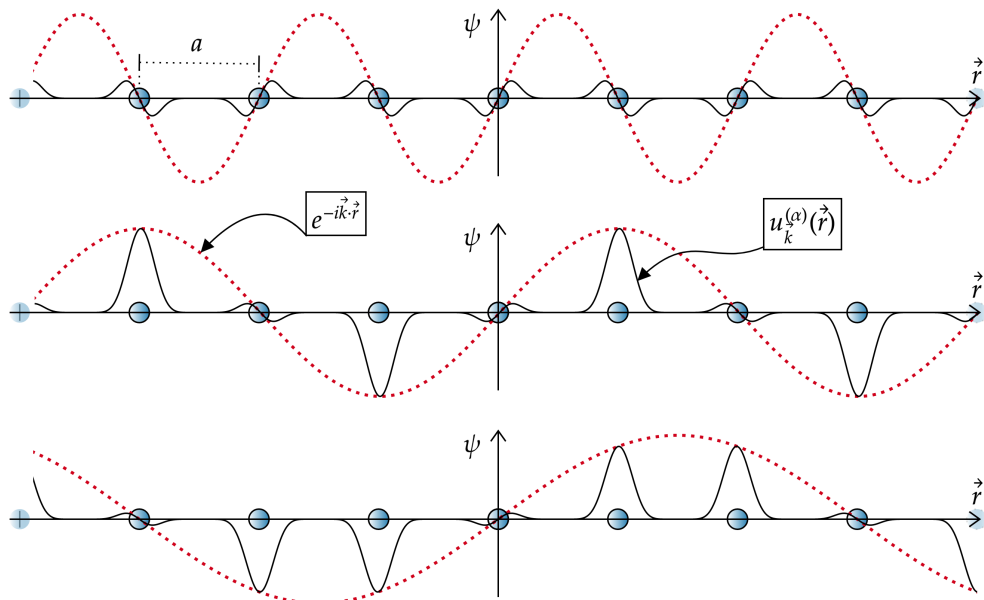
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{\mathbf{R}} V_i(\vec{r} - \vec{R}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1.32)$$

Os somatórios de  $V_i$  são referentes aos potenciais dos átomos na rede. A questão que a equação (1.32) levanta é, qual é a melhor autofunção  $\psi$  que pode descrever este sistema?

O Teorema de Bloch implica categoricamente que para o caso onde nosso potencial de rede admite a relação da equação (1.31), podemos descrever nossa autofunção como:

$$\psi_{\vec{k}}^{(\alpha)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u^{(\alpha)}(\vec{r}), \quad \text{sendo } u^{(\alpha)}(\vec{r} + \vec{R}) = u^{(\alpha)}(\vec{r}). \quad (1.33)$$

O termo  $\alpha$  se chama índice de banda, veremos seu significado nas próximas subseções. Como visto, a equação (1.33) se trata do produto de uma onda plana, a mesma que descreveria um elétron livre, porém, acompanhada de uma função  $u$  com mesma periodicidade da nossa rede de Bravais. É importante mencionar que nossa função de onda não terá a mesma periodicidade de nosso potencial, devido ao termo de onda plana. O termo de onda plana irá modular a função  $u$ , como segue a figura (1.17).



**Figura 1.17** – O comportamento da função de onda de acordo com Bloch.

Como visto na figura (1.17), quando deslocamos nossa função de onda por um vetor da rede de Bravais  $\vec{R}$ , o termo  $u$  da equação (1.33) é invariante, já o termo  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  adquire uma fase. Em suma, o teorema de Bloch nos passa a intuição física de que, para um cristal infinito, em que todas as células unitárias são iguais entre si, não há porque a probabilidade de encontrar o elétron em um sítio ser menor do que outro, como também não há motivo para os observáveis físicos mudarem de uma célula unitária para outra.

### 1.3.2 Método Tight-Binding

O método de aproximação Tight-Binding, é um modelo muito comum para deduzir o comportamento eletrônico de materiais. Para esse tipo de modelo, consideramos que os

orbitais atômicos estão bem localizados no cristal. Vamos observar por exemplo uma rede 1D contendo apenas um orbital em um átomo monovalente, a expressão que temos para o Hamiltoniano do um cristal será:

$$H = K + \sum_{i=1}^N V_i. \quad (1.34)$$

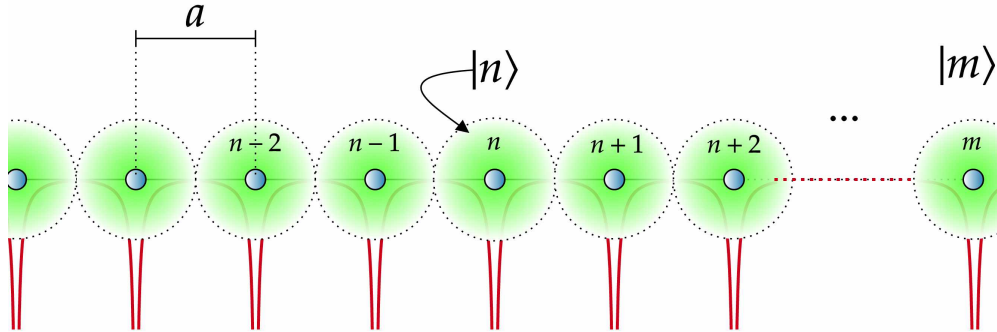
Em que o primeiro termo se refere à energia cinética do elétron e o segundo se refere ao potencial atrator dos átomos. Inferimos que nosso sistema possui condições periódicas de contorno, ou seja, se temos  $N$  sítios, o sítio  $N$  é igual ao sítio 0. Colocamos também a condição que os orbitais são ortogonais entre si, isto é:

$$\langle n|m \rangle = \delta_{n,m} \quad (1.35)$$

Nossa função de onda do elétron se trata de uma somatória de  $N$  termos  $|\phi_n\rangle$  de cada átomo da rede:

$$|\Psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle \quad (1.36)$$

Podemos ver como interpretar isso na figura (1.18):



**Figura 1.18** – Ordenamento das funções de onda dos elétrons em uma rede 1D.

A equação de Schrödinger para esse tipo de sistema já é bem conhecida, sendo:

$$\sum_m H_{nm} \phi_m = E \phi_n \quad (1.37)$$

O ket  $|n\rangle$  remete ao autoestado fundamental do átomo que teríamos caso tivéssemos apenas o átomo  $n$  no sistema (aproximação do átomo livre). Nosso Hamiltoniano pode ser descrito em forma matricial, no caso uma matriz  $N \times N$ :

$$H_{nm} = \langle n|H|m \rangle. \quad (1.38)$$

Vamos estudar um pouco a equação (1.34).  $K$  remete à energia cinética do elétron,  $K = \frac{p^2}{2m}$ .  $V_i$  é a interação coulombiana do elétron na posição  $\vec{r}$  com o núcleo atômico no sítio  $i$ ,

$$V_i = V(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (1.39)$$

sendo  $R_i$  a posição do  $i$  – *ésimo* átomo.

Com isso, obtemos :

$$H|m\rangle = (K + V_m)|m\rangle + \sum_{i \neq m} V_i|m\rangle, \quad (1.40)$$

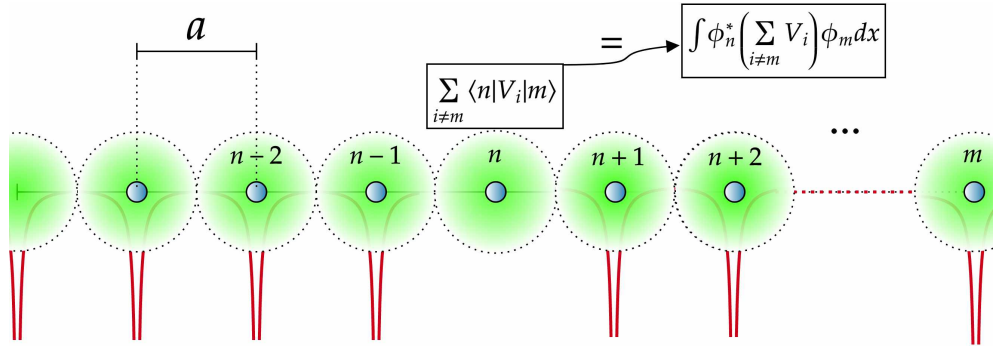
Podemos observar na equação (1.40), que os termos  $(K + V_m)$  são o Hamiltoniano que teríamos para apenas um único átomo, o  $m$  – *ésimo* núcleo, sem qualquer outro átomo vizinho. Tomando os orbitais  $|m\rangle$  como os orbitais atômicos, obtemos:

$$(K + V_m)|m\rangle = \epsilon_{atômico}|m\rangle, \quad (1.41)$$

em que  $\epsilon_{atômico}$  é a energia do elétron no átomo  $m$ , sem a presença de qualquer outro átomo no sistema. Podemos então rescrever a equação (1.38) como:

$$H_{n,m} = \langle n|H|m\rangle = \epsilon_{atômico}\delta_{n,m} + \sum_{i \neq m} \langle n|V_i|m\rangle. \quad (1.42)$$

O somatório da equação (1.42) é um termo de salto do elétron, referindo-se à sua capacidade de conseguir se deslocar de seu orbital para o orbital vizinho, a figura (1.19) pode descrever isso de maneira intuitiva.



**Figura 1.19** – Parâmetro de *hopping* do elétron

Como visto na figura (1.19), quando estamos calculando o fator de salto (*hopping*) do elétron, estamos calculando a integral:

$$\sum_{i \neq n} \langle n|V_i|m\rangle = \int \phi_n^* \left( \sum_{i \neq n} V_i \right) \phi_m dx. \quad (1.43)$$

Vamos lembrar que estamos tratando de orbitais razoavelmente localizados. É intuitivo pensar que os mesmos não tem um *overlap* de grande alcance. Podemos notar que a equação (1.43) envolve 3 índices diferentes, com a condição que  $i \neq n$ . Portanto  $i$  é algum sítio entre  $n$  e  $m$ . Exemplificando, se todas as funções contidas no produto sendo integrado são razoavelmente localizadas, o produto será 0 em todo espaço, logo a integral

será nula. Apenas quando houver algum overlap das 3 funções é que o integrando será diferente de zero. Por isso a integral na equação (1.43) também é chamada de integral de overlap. Com isso, devemos descrever o parâmetro de salto do elétron para diferentes situações, em específico vamos considerar a aproximação para apenas os primeiros vizinhos, em que obtemos as seguintes especificações:

$$\sum_{i \neq m} \langle n | V_i | m \rangle = \begin{cases} V_0 & n = m \\ -t & n = m \pm 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (1.44)$$

Aqui definimos  $V_0$  e  $t$ . Nota-se que os termos da diagonal da matriz são os  $V_0$ , em que o elétron não salta de seu orbital para o vizinho próximo, mas adquire um *shift* em sua energia. O termo  $t$  é conhecido como parâmetro de *hopping*, permitindo a Hamiltoniana de mover os elétrons de um sítio para o outro. A magnitude de  $t$  é relacionada ao quão perto os orbitais estão entre si, aumentando quando estão perto, e decrescendo exponencialmente quando distantes. Devido à invariância translacional, é esperado que nosso resultado apenas dependa das diferenças  $n - m$ . Com a equação (1.44), podemos agora reescrever a equação (1.42) da seguinte maneira:

$$H_{n,m} = (\epsilon_{\text{atômico}} + V_0)\delta_{n,m} - t(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}), \quad (1.45)$$

em que podemos simplificar com  $\epsilon_0 = \epsilon_{\text{atômico}} + V_0$ :

$$H_{n,m} = \epsilon_0\delta_{n,m} - t(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}). \quad (1.46)$$

A Hamiltoniana descrita na equação (1.46) é bem conhecida no modelo *Tight-binding* 1D. Queremos descobrir quais são os autoestados da equação da (1.46), para então poderemos descrever o comportamento das energias possíveis do sistema. Usaremos o seguinte ansatz:

$$\phi_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}. \quad (1.47)$$

O termo do denominador  $\sqrt{N}$ , está relacionado à normalização devido aos  $N$  sítios em nosso sistema.

Vamos considerar as condições periódicas de contorno, isto é, para um sistema de  $N$  sítios de tamanho  $L = Na$ , os valores de  $k$  possíveis são termos quantizados em  $2\pi/L$ , em que há  $N$  possíveis soluções para a equação (1.47). Reescrevendo a equação (1.37) usando o que encontramos na equação (1.46) e o ansatz proposto, obtemos:

$$\sum_m H_{n,m}\phi_m = \epsilon_0 \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} - t \left( \frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{-ik(n-1)a}}{\sqrt{N}} \right). \quad (1.48)$$

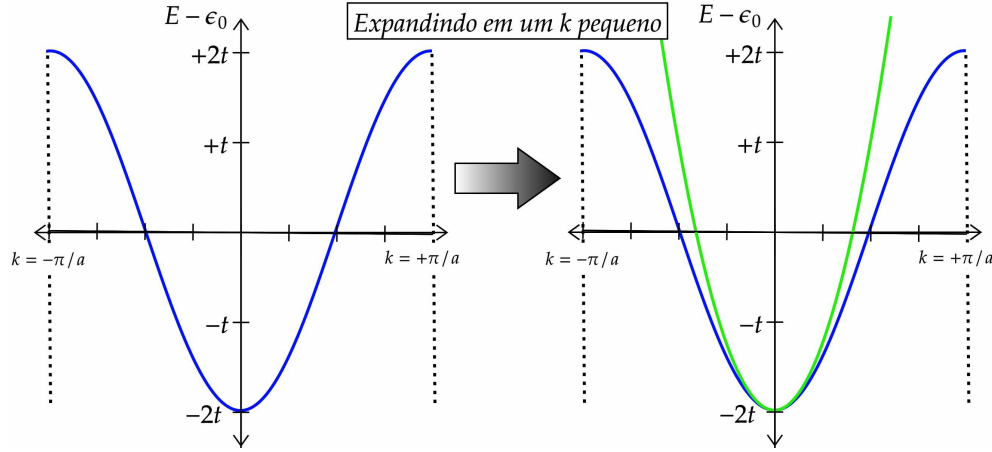


Portanto:

$$\epsilon_0 \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} - t \left( \frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{-ik(n-1)a}}{\sqrt{N}} \right) = E \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}. \quad (1.49)$$

Por fim, isolando  $E$  temos a relação de dispersão da energia, como visto na figura (1.20):

$$E = \epsilon_0 - 2t \cos(ka). \quad (1.50)$$



**Figura 1.20** – Relação de dispersão das energias da rede linear monoatômica .

Um detalhe interessante que podemos constatar sobre a equação (1.50) é que, a dispersão do elétron no ponto de mínima energia da banda é aproximadamente parabólica. Expandindo para  $k$  pequenos, obtemos:

$$E(k) = \text{Constante} + ta^2k^2. \quad (1.51)$$

Como visto na figura (1.20), quando expandimos a energia para valores de  $k$  pequenos, obtemos uma dispersão parabólica, o especial dessa aproximação é que a dispersão parabólica é a do elétron livre:

$$E_{livre}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.52)$$

Com esse tipo de comportamento, podemos concluir que o elétron está se comportando como um elétron livre, porém com uma massa efetiva  $m^*$  diferente:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = ta^2k^2 \longrightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}. \quad (1.53)$$

Em suma, podemos definir a massa efetiva  $m^*$  de modo que a dispersão dos elétrons nas proximidades da energia mínima da banda seja igual a de partículas livres, porém com uma massa  $m^*$ . É importante ressaltar que essa massa efetiva não tem relação com a massa do elétron, visto que na equação (1.53) definimos  $m^*$  em função do parâmetro de *hopping* e do espaçamento entre os átomos. Algo que pode esclarecer melhor isso é lembrarmos que o  $k$  que estamos trabalhando é o momento cristalino, não o momento do elétron em si.

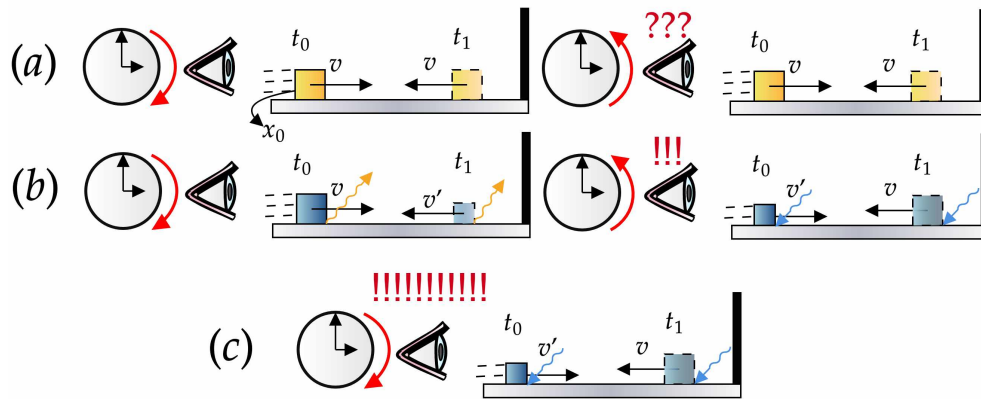
## 1.4 SIMETRIA DE REVERSÃO TEMPORAL

Na física, costumamos aprender que as simetrias possuem um papel de grande importância, pois através delas podemos adquirir informações sobre uma diversidade de processos que podemos estar interessados em estudar.

A reversão temporal (RT) consiste em inverter a direção do eixo do tempo, ou seja:

$$\Theta : t \mapsto -t. \quad (1.54)$$

Para compreender essa operação, podemos recorrer a exemplos bem intuitivos como segue a figura (1.21).



**Figura 1.21** – Exemplo de quebra de simetria de reversão temporal.

Em (a), um cubo é lançado sobre uma superfície e desliza sem atrito até colidir com uma parede, voltando então à sua posição de origem. Se filmarmos esse evento, com o cubo já em movimento, um observador que assista a filmagem não conseguirá descrever qual o sentido real do movimento do cubo, pois a filmagem real e a de trás para frente são indistinguíveis. Nesta situação podemos dizer que a simetria de RT é conservada. Em (b), pegamos o mesmo cubo porém agora temos atrito e ele é de gelo, o observador ao ver a filmagem poderá distinguir facilmente qual o sentido do tempo nas gravações, pois o cubo se aquece devido ao atrito e derrete, este é um processo em que a RT não é válida, portanto a simetria é quebrada. O caso (c) ilustra um caso impossível, em que demonstra a reversibilidade temporal do processo de derretimento do cubo de gelo.

### 1.4.1 Reversão temporal em sistemas clássicos

Como podemos perceber, a RT está ligada com as variáveis dinâmicas de um sistema. Em exemplo, vamos observar o comportamento da segunda lei de Newton:

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2} \xrightarrow{\Theta} \Theta F = m \Theta \frac{d^2 x}{dt^2}. \quad (1.55)$$

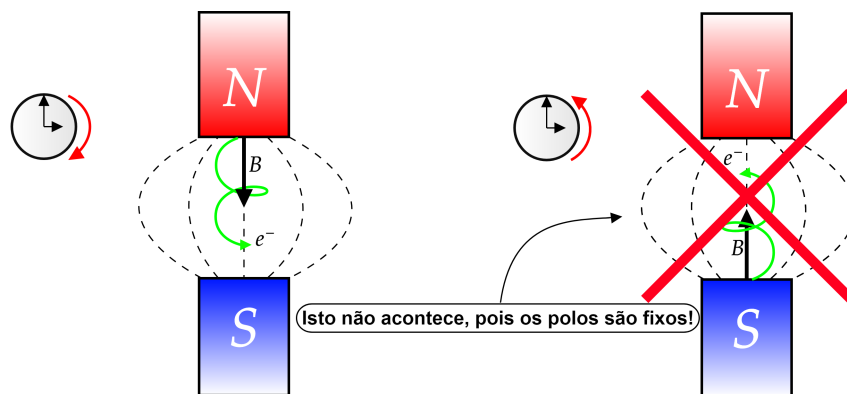
em que obtemos:

$$\begin{aligned} F &= m \left( -\frac{d}{dt} \right) \left( -\frac{d}{dt} \right) x \\ F &= m \frac{d^2 x}{dt^2} \end{aligned} \quad (1.56)$$

Implicando que a equação de movimento é invariante. Já para as equações de Maxwell:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho & \nabla \cdot \Theta \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \cdot \Theta \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} & \nabla \times \Theta \mathbf{B} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Theta \mathbf{E}}{\partial t} &= -\frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \\ \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 & \nabla \times \Theta \mathbf{E} - \frac{\partial \Theta \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \end{aligned} \quad (1.57)$$

Observamos que a RT implica a mudança no sentido da corrente, em que  $\Theta \mathbf{J} = -\mathbf{J}$ . A lei de Gauss nos dá a igualdade  $\Theta \mathbf{E} = \mathbf{E}$ . Já a lei de Ampere implica que  $\Theta \mathbf{B} = -\mathbf{B}$ , visto que a RT irá inverter o sentido da corrente  $\mathbf{J}$ , o campo magnético também deve inverter. Isso muda quando tratamos de um campo magnético externo constante, como Imã, quebrando a simetria de RT, como segue a figura (1.22).



**Figura 1.22** – Reversão temporal na presença de um campo  $B$  externo.

## 1.4.2 Reversão temporal em mecânica quântica

**Nota:** Esta subseção é baseada em conceitos abordados em livros de mecânica quântica. Para mais detalhes, o livro texto usados como base pode ser visto na referência [25].

Vamos discutir seu efeito na mecânica quântica. A transformação  $\Theta t \longrightarrow t' = -t$  do tempo, implica também que nossos estados  $\psi(t)$  e observáveis  $Q$  também reajam a mudança do sentido do tempo, implicando que:

$$\Theta|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad \Theta Q(t)\Theta^{-1} = Q'(t'). \quad (1.58)$$

Deste modo, por exemplo,  $\Theta x\Theta^{-1} = x'$ ,  $\Theta p\Theta^{-1} = p'$  e  $\Theta\sigma\Theta^{-1} = \sigma'$ . Podemos notar que  $\Theta$  precisa ser uma transformação cinematicamente admissível, isto é, deve haver consistência nas relações de comutação. Podemos dizer então, que ao aplicar o operador TR,  $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$  e  $[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$  devem manter sua relação de comutação. Aqui também é imposto que as condições clássicas também se mantenham:

$$\Theta x\Theta^{-1} = x, \quad \Theta p\Theta^{-1} = -p, \quad \Theta\sigma\Theta^{-1} = -\sigma. \quad (1.59)$$

Portanto,  $\Theta [x_i, p_j] \Theta^{-1} = [x'_i, p'_j] = [x_i, -p_j] = -[x_i, p_j]$ . Usando a relação  $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ , obtemos um resultado importante:

$$\Theta i\Theta^{-1} = -i. \quad (1.60)$$

Isso implica que  $\Theta$  precisa incluir o operador  $K$ , que age em qualquer número complexo  $z$  e o transforma em seu complexo conjugado.

$$KzK^{-1} = z^* \quad \longrightarrow \quad K^{-1} = K. \quad (1.61)$$

As relações de comutação são invariantes sob qualquer transformação linear, portanto o operador  $\Theta$  pode ser escrito como:

$$\Theta = UK, \quad (1.62)$$

Sendo  $U$  uma transformação linear. Seja  $|\psi\rangle$  um estado quântico. Temos que  $\Theta|\psi\rangle = |\psi'\rangle$  também deve ser um estado que pertence ao mesmo espaço de Hilbert, implicando então, que  $U$  é unitário.

Como  $\Theta$  deve ser uma transformação cinematicamente admissível, temos a seguinte condição: Na ausência de interações ou presença de forças externas no sistema, para uma partícula livre, as equações que descrevem os parâmetros dinâmicos devem ser invariantes quando aplicado o operador  $\Theta$ , portanto é presumível que:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H_0|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}|\psi'\rangle = H_0|\psi'\rangle, \quad t' = -t, \quad (1.63)$$

sendo  $H_0$  o operador que representa a energia cinética de todo nosso Hamiltoniano. Vamos aplicar a equação (1.62) em ambos os lados da primeira igualdade na equação (1.63):

$$\begin{aligned}
\Theta i\hbar \Theta^{-1} \Theta \frac{\partial}{\partial t} \Theta^{-1} \Theta |\psi\rangle &= \Theta H_0 \Theta^{-1} \Theta |\psi\rangle \\
\Rightarrow UK i\hbar K^{-1} U^{-1} UK \frac{\partial}{\partial t} K^{-1} U^{-1} |\psi'\rangle &= (\Theta H_0 \Theta^{-1}) |\psi'\rangle \\
\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} |\psi'\rangle = \Theta H_0 \Theta^{-1} |\psi'\rangle
\end{aligned} \tag{1.64}$$

Como os elementos de  $H_0$  são termos quadráticos de momento, a condição  $\Theta H_0 \Theta^{-1} = H_0$  é satisfeita devido à equação (1.59), portanto  $\Theta = UK$  é satisfeito também.

Da equação (1.64), a relação importante que notamos é que o operador  $\Theta$  é anti-unitário, visto que  $\Theta \neq U$  porém também  $\Theta = UK$ . O operador  $\Theta$  está contido em uma classe de operadores que o físico Eugene Wigner chama de involutivo. Para essa classe de operadores, quando repetidos eles voltam ao seu estado inicial. Isso implica que para um operador  $G$  contido nessa classe, tem-se que  $G^2 = nI$ , onde  $n = e^{i\theta}$  e  $I$  é o operador identidade. Portanto, para operações do tipo  $G^2$ , voltamos para o mesmo estado, porém com uma fase.

Para o operador  $\Theta$ , como Wigner nos mostra, ele é involutivo, isso implica que  $\Theta^2 = \eta I$ , em que  $\eta = \pm 1$ . Para podermos provar essa relação, considere  $\Theta$ , em que  $U$  é unitário em  $\Theta = UK$ :

$$\begin{aligned}
\Theta^2 &= UKUK \\
&= UKUK^{-1} \quad [\text{Usando a equação (1.61)}] \\
&= UU^* \\
U^{-1} = U^\dagger = \tilde{U}^* &\Rightarrow U^* = \tilde{U}^{-1} \Rightarrow \Theta^2 = U\tilde{U}^{-1} = \eta I \\
&\Rightarrow U = \eta\tilde{U} \quad \text{ou} \quad \tilde{U} = \eta U
\end{aligned} \tag{1.65}$$

Assim, obtemos:

$$U = \eta\tilde{U} = \eta^2 U \Rightarrow \eta = \pm 1 \Rightarrow \Theta^2 = \pm I. \tag{1.66}$$

Para a equação (1.66) ser de fato verdade, precisamos que  $\eta$  seja real, isso pode ser provado com:

$$\begin{aligned}
\Theta^2 = \eta I &\Rightarrow \Theta \eta I \Theta^{-1} = \Theta \Theta^2 \Theta^{-1}, \quad \text{logo} \\
\eta^* I = \Theta^2 = \eta I &\Rightarrow \eta = \eta^* \\
&\Rightarrow \eta \text{ é real.}
\end{aligned} \tag{1.67}$$

Conseqüentemente, temos sistemas pares ( $\Theta^2 = 1$ ) e ímpares ( $\Theta^2 = -1$ ). O sinal que temos em  $\Theta^2$  é definido pela propriedades do operador  $U$ . Para um operador anti-unitário, uma propriedade fundamental que temos é  $\langle \Theta\psi | \Theta\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$ , e pode ser

vista na seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
\langle \Theta\psi | \Theta\phi \rangle &= \langle UK\psi | UK\phi \rangle \\
&= \langle U\psi^* | U\phi^* \rangle = \langle \psi^* | U^\dagger U \phi^* \rangle = \langle \psi^* | \phi^* \rangle \\
&= \langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle
\end{aligned} \tag{1.68}$$

Note que o produto interno  $\langle \psi | \phi \rangle^*$  é escalar, então seu hermitiano conjugado é apenas seu complexo conjugado, isto é,  $(\langle \psi | \phi \rangle)^\dagger = \langle \psi | \phi \rangle^*$ . O resultado obtido em (1.68) é válido para qualquer tipo de  $U$ . Tal equação implica que quando estamos sob uma transformação  $\Theta$ , a probabilidade  $|\langle \psi | \phi \rangle|^2$  é conservada. Um ponto interessante a estudar é uma propriedade que temos quando  $\Theta^2 = -1$ . Vamos considerar dois estados,  $|\psi\rangle$  e  $|\Theta\psi\rangle$ , temos que:

$$\langle \Theta\psi | \psi \rangle = \langle \Theta\psi | \Theta^2\psi \rangle = -(\Theta\psi | \psi) \quad \Rightarrow \quad \langle \Theta\psi | \psi \rangle = 0. \tag{1.69}$$

Na equação (1.69), resolve-se o primeiro passo usando o que achamos na equação (1.68), no segundo usamos a relação  $\Theta^2 = -1$ . Assim sendo,  $|\psi\rangle$  e  $|\Theta\psi\rangle$  devem ser diferentes e ortogonais ( $\Theta^2 = 1$  não se altera). O que temos aqui é a base para a degenerescência de Kramers. Podemos prová-la considerando que  $H$  é invariante, ou seja,  $\Theta H \Theta^{-1} = H$ . Aplicando  $\Theta$  em ambos os lados de  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , obtemos :

$$\Theta H \Theta^{-1} \Theta |\psi\rangle = E \Theta |\psi\rangle \xrightarrow{\Theta H \Theta^{-1} = H} H(\Theta |\psi\rangle) = E(\Theta |\psi\rangle), \tag{1.70}$$

onde usamos o resultado de que  $E$  é real. O mais interessante é que a equação (1.70) nos mostra que  $|\psi\rangle$  e  $\Theta|\psi\rangle$  possuem a mesma energia  $E$  se  $\Theta H \Theta^{-1} = H$  e são ortogonais para  $\Theta^2 = -1$ . Portanto, para esse tipo de sistema teremos no mínimo uma degenerescência em par, a degenerescência de Kramers.

## 1.5 SIMETRIA DE PARIDADE

A paridade refere-se à inversão das coordenadas espaciais, ou seja:

$$\mathcal{P} : x \longmapsto -x. \tag{1.71}$$

Para compreender melhor essa operação, podemos recorrer a um simples exemplo, porém bem intuitivo como mostra a figura (1.23). Como visto, a inversão de coordenadas espaciais é algo similar a observar um fenômeno através de um espelho especial, em que ele não apenas inverte uma coordenada como espelhos normais que estamos acostumados, mas também inverte todas. Na figura (1.23), o exemplo (a) é claramente distinguível qual objeto é a reflexão, neste caso, temos que há a quebra de simetria de  $\mathcal{P}$ . Já no exemplo (b), não podemos diferenciar uma foto tirada diretamente do objeto ou através do espelho, portanto a há a conservação da simetria de  $\mathcal{P}$ .

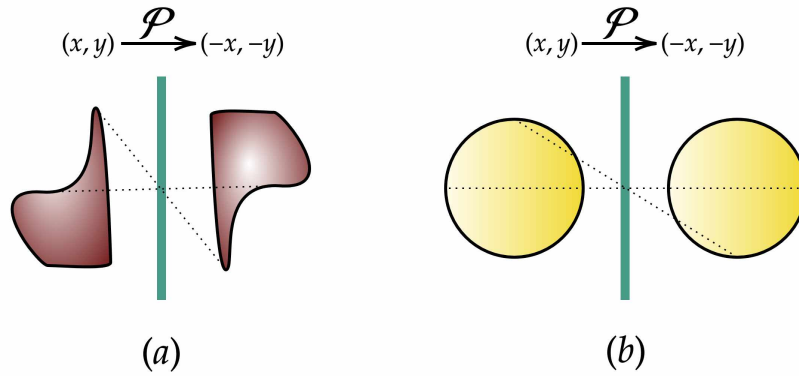


Figura 1.23 – Exemplo de simetria de paridade.

### 1.5.1 Paridade em mecânica clássica.

Vamos observar o que acontece com o o momento de uma partícula quando implicamos a paridade nas equações:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}\vec{p} &= \mathcal{P}\left(m\frac{d\vec{x}}{dt}\right) \\
 &= m\frac{d(\mathcal{P}\vec{x})}{dt} \\
 &= -\vec{p}
 \end{aligned}
 \tag{1.72}$$

Para elementos vetoriais que se transformam como o vetor momento, dizemos que possuem paridade ímpar. Já o momento angular:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}\vec{L} &= \mathcal{P}(\vec{x} \times \vec{p}) \\
 &= (-\vec{x}) \times (-\vec{p}) \\
 &= \vec{L}
 \end{aligned}
 \tag{1.73}$$

Aqui notamos que  $\vec{L}$  é invariante , implicando que o momento angular possui paridade par.

### 1.5.2 Paridade em mecânica quântica

**Nota:** Esta subseção é baseada em conceitos abordados em livros de mecânica quântica. Para mais detalhes, o livro texto usados como base pode ser visto na referência [25].

Definimos o operador paridade em mecânica quântica através da sua ação no ket da posição:

$$\hat{\mathcal{P}}|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle.
 \tag{1.74}$$

Por outro lado, o operador de paridade afeta ao deixar o operador posição  $\hat{X}$  atuar em sua base afetada por  $\hat{\mathcal{P}}$ .

$$\hat{X}\hat{\mathcal{P}}|\mathbf{x}\rangle = \hat{X}|-\mathbf{x}\rangle = -\mathbf{x}|-\mathbf{x}\rangle. \quad (1.75)$$

Agindo nos dois lados:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{X} \hat{\mathcal{P}}|\mathbf{x}\rangle &= -\mathbf{x} \hat{\mathcal{P}}^\dagger |-\mathbf{x}\rangle \\ &= -\mathbf{x} \hat{\mathcal{P}} |-\mathbf{x}\rangle \\ &= -\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \\ &= -\hat{X} |\mathbf{x}\rangle \end{aligned} \quad (1.76)$$

Isso demonstra que o operador posição possui paridade ímpar, como no caso clássico.

Vamos analisar o operador momento  $\hat{P}$ . Para uma translação infinitesimal, podemos definir um operador de translação como  $\hat{\mathcal{T}}(\epsilon) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \cdot \hat{P}$ , e obtemos<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{T}}(\epsilon) &= \hat{\mathcal{T}}(-\epsilon) \hat{\mathcal{P}}^\dagger \\ \hat{\mathcal{P}}^\dagger \left( \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \cdot \hat{P} \right) \hat{\mathcal{P}} &= \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \epsilon \cdot \hat{P} \\ \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \cdot \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{P} \hat{\mathcal{P}} &= \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \epsilon \cdot \hat{P} \\ -\epsilon \cdot \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{P} \hat{\mathcal{P}} &= \epsilon \cdot \hat{P} \end{aligned} \quad (1.77)$$

Como o termo  $\epsilon$  é arbitrário na translação, sabemos que o operador momento possui paridade ímpar:

$$\hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{P} \hat{\mathcal{P}} = -\hat{P} \quad (1.78)$$

Vamos checar o momento angular, este sendo  $\hat{L} = \hat{X} \times \hat{P}$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{L}_i \hat{\mathcal{P}} &= \hat{\mathcal{P}}^\dagger \left( \epsilon_{ijk} \hat{X}_j \hat{P}_k \right) \hat{\mathcal{P}} \\ &= \epsilon_{ijk} \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{X}_j \left( \hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}}^\dagger \right) \hat{P}_k \hat{\mathcal{P}} \\ &= \epsilon_{ijk} \left( \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{X}_j \hat{\mathcal{P}} \right) \left( \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{P}_k \hat{\mathcal{P}} \right) \\ &= \epsilon_{ijk} \left( -\hat{X}_j \right) \left( -\hat{P}_k \right) \\ &= L_i \end{aligned} \quad (1.79)$$

Logo, assim como no caso clássico, o momento possui paridade par,

$$\hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{L} \hat{\mathcal{P}} = \hat{L}. \quad (1.80)$$

Por fim, vamos observar a paridade da função de onda, vamos considerar um espaço de Hilbert, cuja base é:

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle. \quad (1.81)$$

<sup>1</sup> É possível mostrar que uma translação seguida de uma inversão é equivalente à inversão seguida de translação oposta, veja a seção 4.2 do Sakurai [25].



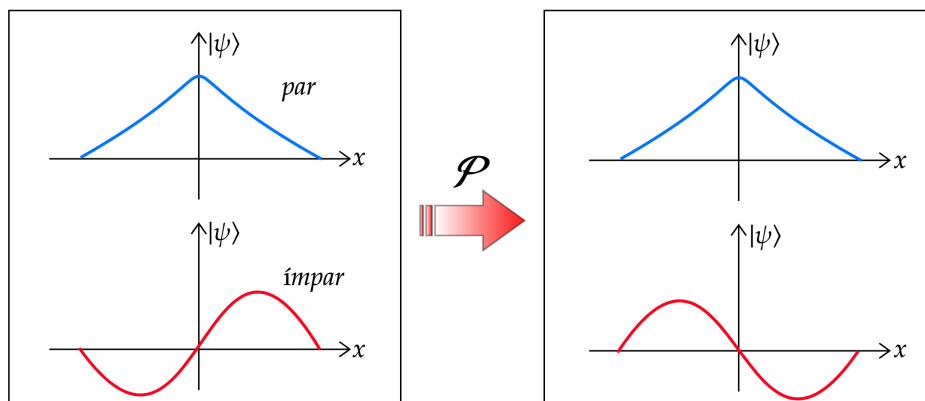
Se aplicarmos o operador  $\hat{\mathcal{P}}$  no estado  $|\psi\rangle$ , a função de onda se torna:

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \hat{\mathcal{P}} | \psi \rangle. \quad (1.82)$$

Como  $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}$ , obtemos que :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\psi(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{x} | (\hat{\mathcal{P}} | \psi \rangle) \\ &= \langle \mathbf{x} | \hat{\mathcal{P}}^\dagger | \psi \rangle \\ &= \langle -\mathbf{x} | \psi \rangle \\ &= \psi(-\mathbf{x}) \longrightarrow \pm \psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (1.83)$$

Apesar do resultado final na equação (1.83) ter invertido o argumento, isso é relativo à paridade da função de onda, sendo  $+\psi(\mathbf{x})$  se tivermos uma função de onda de paridade par e  $-\psi(\mathbf{x})$  caso ela tenha paridade ímpar, como vemos na figura (1.24).

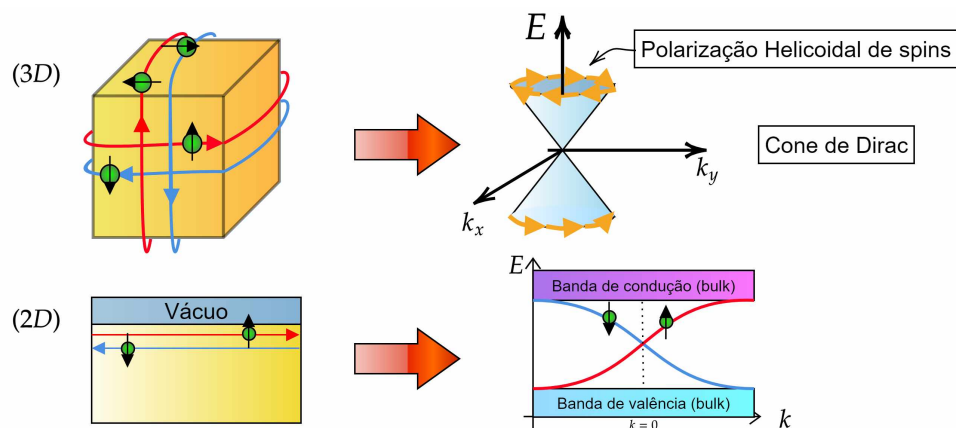


**Figura 1.24** – Exemplo de envolvendo a função de onda e paridade.

## 2 ISOLANTES TOPOLÓGICOS

No campo de estudo da física da matéria condensada existe uma grande preocupação em compreender como a ordem surge em sistemas que apresentam um amplo número de elementos que os constituem, como elétrons, íons ou momentos magnéticos, que interagem consigo mesmos. Em particular, sistemas com fases ordenadas como cristais ou magnetos, a ordem pode ser descrita através da quebra de simetria. Em um cristal, íons e elétrons possuem um arranjo periódico em sua rede suportando suas próprias interações eletrostáticas, portanto, há a quebra de simetria na continuidade do espaço na rede real por meio de rotações ou translações. Em magnetos, podemos observar o mesmo através da quebra de simetria de rotação no espaço dos spins junto à quebra de reversão temporal. Em suma, trabalhar com as simetrias presentes nos materiais nos revelam muito sobre seu funcionamento.

Como vimos na seção 1.1.4, no ano de 1980, os físicos Klaus von Klitzing, Gerhard Dorda e Michael Pepper descobriram que elétrons confinados em sistemas de baixa dimensionalidade (2D) submetidos a um campo magnético forte e a baixas temperaturas, apresentam comportamentos exóticos e uma ordem topológica completamente diferente. Mostrando que ao quebrar a simetria TR, obtemos uma novo invariante topológico, o  $\nu$ , sendo o primeiro efeito Hall apresentando natureza topológica. Para sistemas em três dimensões, ao invés de bordas de condução, temos estados de superfície, onde elétrons conduzem apenas na superfície do material, enquanto no *bulk* agem como isolantes, a figura (2.1) demonstra de maneira intuitiva.



**Figura 2.1** – IT's 2D e 3D e suas respectivas dispersões de energia

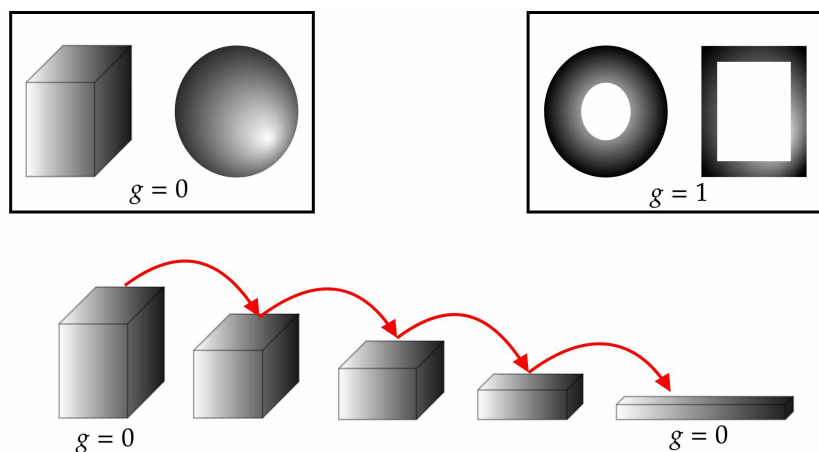
O termo “topológico” advém do fato de que estamos trabalhando em um espaço de Hilbert com topologia não trivial. As consequências da topologia não trivial é que, quando um isolante possui uma delimitação espacial cuja fronteira é um isolante trivial

ou também o próprio vácuo, necessariamente surge um estado sem gap entre as bandas de condução e de valência do *bulk* do material. Em suma, podemos apontar as principais características dos IT's como sendo [26–29] :

- Presença de interação spin órbita;
- Dispersão tipo cone de Dirac perto de  $\epsilon_f$ ;
- Presença de estados de borda com polarização de spin;
- Transição de fase topológica.

## 2.1 INVARIANTE TOPOLÓGICO

A topologia é uma área da matemática que trata das propriedades espaciais de objetos que são preservadas através de deformações contínuas e suaves. Isso implica que um cubo e uma esfera estão contidos na mesma classe topológica, assim como um torus está para um xícara de café. Podemos dizer então, que é possível tornar um cubo em um paralelepípedo retângulo através de deformações suaves, sem alternar sua classe topológica, como vemos na figura (2.2).



**Figura 2.2** – Processo de deformação de um cubo para um paralelepípedo.

Para esses objetos, notamos que há um elemento que é um invariante topológico, mesmo que deformemos o cubo, seu número de buracos não muda, mesmo que pegássemos o cubo da figura (2.2) e o deformássemos em uma esfera, ainda não mudaria. O teorema de Gauss-Bonnet implica que a integral de curvatura de Gauss sobre toda a superfície do objeto é um invariante topológico:

$$\int_M \kappa dA = 2\pi\chi = 2\pi(2 - 2g), \quad (2.1)$$

onde  $g$  é o número de buracos na no objeto. Para sistemas físicos, no lugar da superfície dos objetos, usamos a zona de Brillouin e no lugar da curvatura da superfície, temos a fase de Berry. A fase de Berry se adquire ao longo de ciclos, isto é, quando nosso sistema é sujeito a processos adiabáticos cíclicos, sendo esses processos dependentes do parâmetro espacial de nosso Hamiltoniano. Para um cristal, o parâmetro espacial que temos é o momento cristalino, uma mudança no comportamento da função de onda dos elétrons gera uma conexão de Berry  $\mathcal{A}_m$  e uma fase de Berry  $\mathcal{F}_m$ .

$$\mathcal{F}_m = \nabla \times \mathcal{A}_m, \quad \mathcal{A}_m = i \langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle. \quad (2.2)$$

O termo  $\nu$  que temos na equação (1.13) da condutividade de Hall, é um invariante topológico chamado de primeiro número de Chern. Podemos reescrevê-lo como uma integral de  $\mathcal{F}$  sobre o espaço de momento:

$$\begin{aligned} \nu &= \sum_{m=1}^N \nu_m, \text{ (número de Chern)} \\ \longrightarrow \nu_m &= \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} \mathcal{F}_m \end{aligned}, \quad (2.3)$$

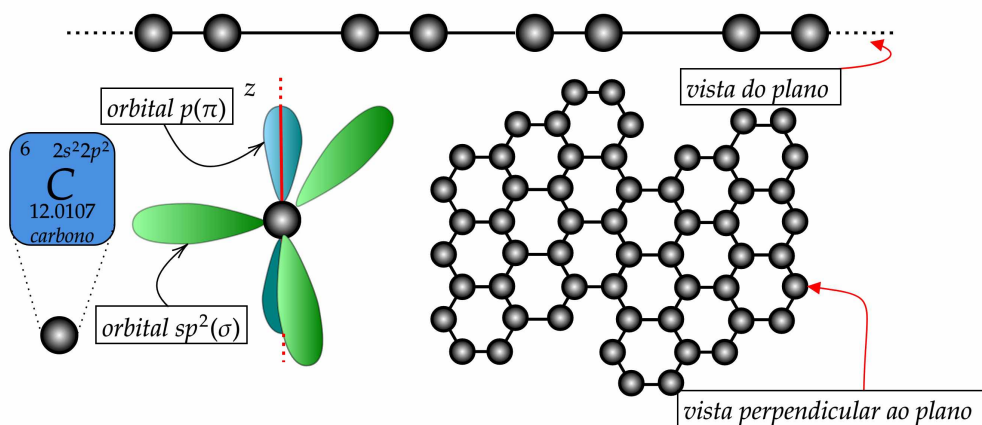
onde o termo  $m$  indica as diferentes bandas de valência. Para mais detalhes sobre o número de Chern e a fase de Berry, veja a referência [30]. Em suma, se analisarmos dois materiais diferentes, em que podemos aplicar uma transformação adiabática em um dos parâmetros de sua Hamiltoniana de modo que o *gap* de energia nas bandas não feche, eles podem ser classificados sob a mesma classe topológica. Através disso, podemos caracterizar materiais que são isolantes triviais, semicondutores e também o próprio vácuo como sistema que apresentam uma topologia trivial. Os Isolantes Topológicos possuem topologia não trivial. Tomando como exemplo o observado pelo grupo de Laurens Molenkamp em 2007, envolvendo poços quânticos [31], quando temos uma interface que separa dois estados isolantes, um trivial como o telureto de Cádmio ( $CdTe$ ) e um não trivial como o telureto de mercúrio ( $HgTe$ ), temos números de Chern diferentes em cada interface. Isso resulta no fechamento do gap de energia,<sup>1</sup> fazendo com que o invariante topológico do sistema mude, ou seja, sua classe topológica, o que da origem aos estados condutores de superfície e de borda.

## 2.2 GRAFENO

O carbono ( $C$ ) é um elemento químico abundante na natureza, fundamentalmente ligado a muitas formas de vida, e presente na base da química orgânica. Devido à sua capacidade de ligação treza-valente, sistemas a base de carbono podem apresentar inúmeras

<sup>1</sup> Neste artigo, também é mostrado que podemos manipular o fechamento do gap através da largura do poço quântico de  $HgTe$ .

estruturas complexas e uma grande diversidade de propriedades físicas. Suas propriedades físicas são, na maioria das vezes, o resultado da dimensão das estruturas que podemos sintetizar. Um desses possíveis sistemas é o grafeno, contendo apenas átomos de carbono, sendo um alótropo muito importante em física do estado sólido, pois ele é tido como base para entender a estrutura eletrônica de outros materiais que apresentem geometria pariforme ao mesmo. O ordenamento do grafeno é uma rede hexagonal bidimensional plana, isto é, temos apenas uma camada monoatômica. Sua estrutura se assemelha a anéis benzênicos na ausência do hidrogênio, podemos ver isso na figura (2.3).

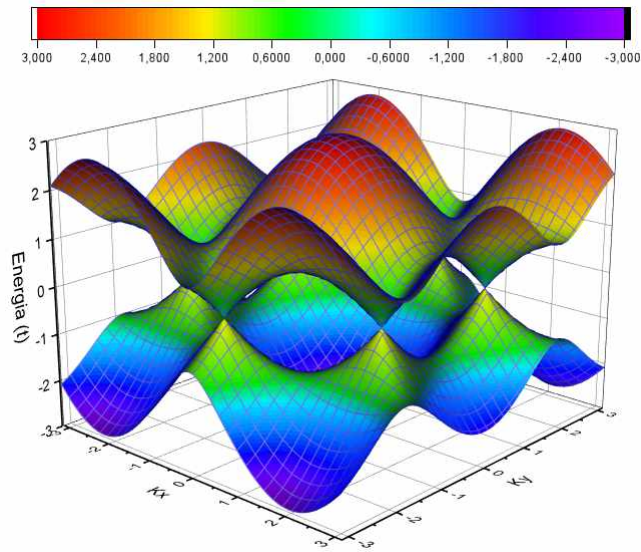


**Figura 2.3** – Estrutura tipo monocamada do Grafeno.

A capacidade de intermediar complexas combinações e ligações químicas no grafeno reflete-se em sua estrutura eletrônica. No caso, estamos falando da hibridização do tipo  $sp^2$  entre um orbital  $s$  e dois orbitais  $p$ , que gera uma estrutura trigonal plana, gerando um espaçamento entre os átomos de  $1.42\text{\AA}$ . As ligações do tipo  $\sigma$  são as responsáveis pela robustez da rede do grafeno. Como podemos ver na figura (2.3), essas ligações estão presentes em todo plano da estrutura, e como vemos em química, as ligações covalentes tipo  $\sigma$  são bem fortes, mantêm os átomos em uma ligação estável. O orbital  $p_z$  por outro lado, fica perpendicular ao plano, podendo então formar ligações covalentes entre os seus vizinhos próximos. Como o carbono é um átomo trivalente, temos um elétron sobrando no orbital  $p_z$ . Neste caso, temos que o orbital  $p_z$  está preenchido pela metade.

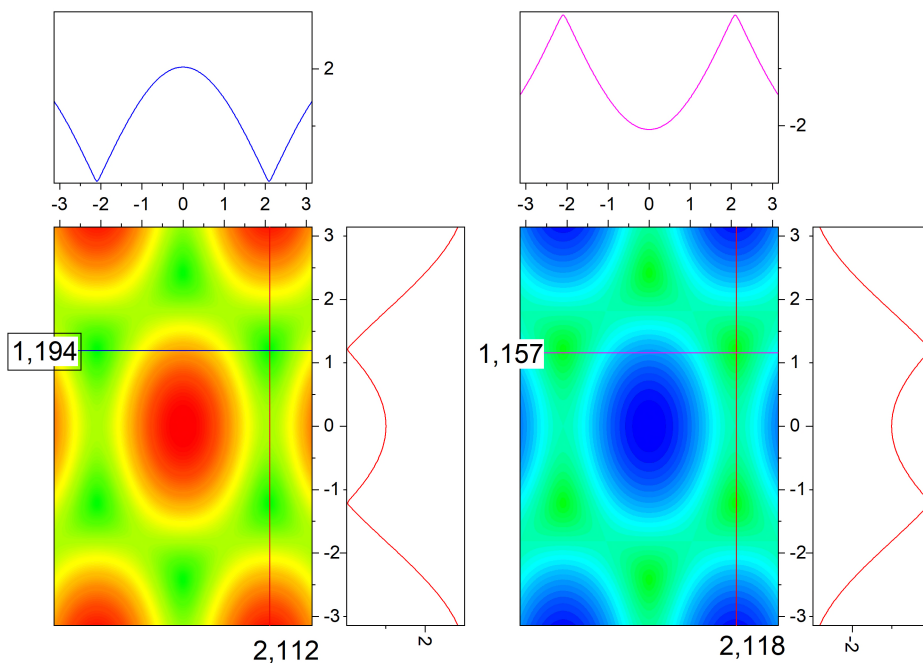
Já é conhecido que orbitais preenchidos pela metade em metais de transição afetam drasticamente a física do sistema em partículas fortemente correlacionadas [32]. Para o grafeno, o mesmo apresenta um resultado muito interessante quando resolvemos sua estrutura de banda usando o método *tight-binding* [33]. Sua estrutura eletrônica está resolvida pelo método *tight-binding* (contendo apenas os primeiros vizinhos) no apêndice A.

Quando resolvido pelo método *tight-binding* contendo os primeiros vizinhos, o espectro esperado do grafeno pode ser visto na figura (2.4) a seguir:



**Figura 2.4** – Espectro de energia do Grafeno.

O método *tight – binding* do grafeno trata de resolver o espectro de energia para os elétrons do orbital  $p$ . Na figura (2.4) podemos observar que os elétrons abaixo do nível de Fermi estão todos preenchidos. Nota-se também os cones de Dirac nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , que podemos ver em mais detalhes na figura (2.5).



**Figura 2.5** – Cones de Dirac nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  nas bandas de condução e valência.

O tratamento dos cones de Dirac estão contemplados no apêndice (B).

É sabido que os cones de Dirac possuem localmente uma dispersão linear, como podemos ver na figura (2.5). Esse é um comportamento característicos de partículas relativísticas [34] e no grafeno é presente . Em especial, temos que não há gap nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , o que faz podermos caracterizar o grafeno como um semi-metal.

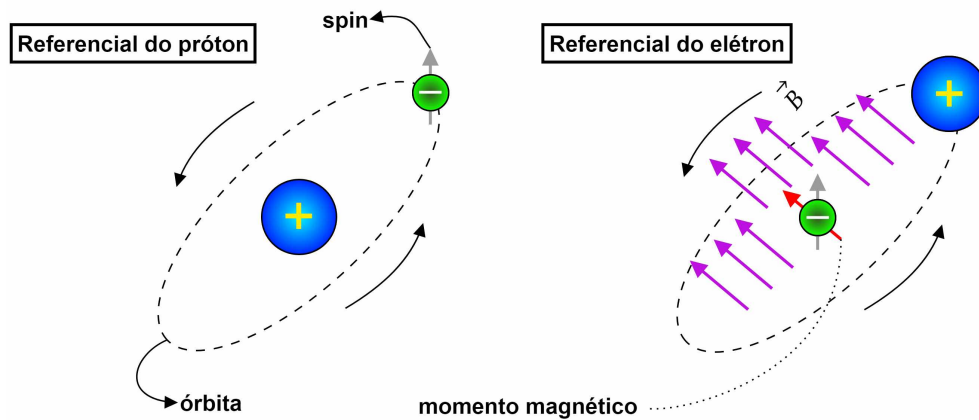
Como visto na seção (1.4.6), os físicos Charlie Kane e Eugene Mele propuseram em 2005 que o grafeno poderia conter uma fase topológica não trivial devido ao estado Hall quântico de spin. Para isso, precisamos introduzir o efeito spin-órbita, de modo que poderíamos abrir o gap nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ . Isso foi frustrado posteriormente, visto que o efeito spin órbita do grafeno é muito pequeno, na ordem de  $\mu eV$  e apenas perceptível em temperaturas da ordem de  $4K$ , como podemos ver no recente trabalho de J. Sichau e sua equipe, publicado este presente ano de 2019 [35].

## 2.3 EFEITO SPIN-ÓRBITA

**Nota:** Esta subseção é baseada em conceitos abordados em livros de mecânica quântica. Para mais detalhes, o livro texto usados como base pode ser visto na referência [36] .

Como vimos nas seções anteriores o efeito spin-órbita (SO) tem um importante papel no estudos do isolantes topológicos de spin. A tecnologia atual envolvendo os IT's está fortemente conecta à spintrônica, onde temos números crescentes de novas pesquisas.

Vamos supor que podemos observar a dinâmica de um átomo de hidrogênio através da perspectiva de um elétron, como vemos na figura (2.6).



**Figura 2.6** – Esquema da interação spin-órbita do átomo de hidrogênio.

Como podemos ver, no referencial do elétron, o núcleo do átomo que o está orbitando. A órbita do próton gera uma corrente em formato de espira de raio  $r_n$ , sendo  $r_n$  o n-ésimo

raio do modelo de Bohr, de modo que cria um campo magnético  $\vec{B}$  paralelo ao momento orbital do elétron no referencial do próton. O Hamiltoniano para este sistema é :

$$H = \vec{\mu}_s \cdot \vec{B}. \quad (2.4)$$

O campo magnético que o próton gera é semelhante ao de uma espira e, por conveniência, vamos dizer que ele está apenas contido no eixo  $z$ . Podemos deduzir que  $B_z = \frac{\mu_0 I}{2r_n}$ , em que a corrente é  $I = \frac{Ze}{T}$ , como estamos falando do átomo de hidrogênio o termo  $Z$  é igual a 1, porém vamos manter  $Z$  ao longo das contas. O período de rotação tem sua expressão  $T = \frac{2\pi r_n}{v_n}$ , onde  $v_n$  é a velocidade do elétron na  $n$ -ésima órbita. Ajustando esses termos de modo a excluir o período de rotação  $T$ , obtemos que a expressão do campo  $\vec{B}$  é:

$$B_z = \frac{\mu_0 Z e v_n}{4\pi r_n^2}, \quad (2.5)$$

substituindo os termos  $v_n$  e  $r_n$  fornecidos pelo modelo de Bohr, estes :

$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\pi m_e Z e^2} \quad \text{e} \quad v_n = \frac{Z e^2}{2\epsilon_0 \hbar n}, \quad (2.6)$$

a expressão de  $B_z$  se torna:

$$B_z = \left( \frac{Z^4}{n^5} \right) \cdot \frac{e^4 m_e^2 \mu_0 \pi}{8\epsilon_0^3 \hbar^3}. \quad (2.7)$$

Vamos reescrever novamente a expressão, lembrando da constante de estrutura fina  $\alpha$ , onde :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \text{e} \quad a_0 = \frac{\hbar c}{e^2} \cdot \frac{\hbar}{m_e c} = \frac{1}{\alpha} \lambda_c, \quad (2.8)$$

onde  $\lambda_c$  é o comprimento de onda de Compton do elétron. Nosso campo  $B_z$  tem a seguinte expressão:

$$B_z = \left( \frac{Z^4}{n^5} \right) \cdot \frac{\mu_0 \alpha c e}{4\pi a_0^2}. \quad (2.9)$$

Calculando para o caso para o nosso exemplo, onde  $Z = 1$  e estamos no orbital  $n = 1$ , obtemos um campo da ordem de aproximadamente 12 Teslas, isso é um campo muito forte.

Voltando à nossa hamiltoniana da equação (2.4), como visto no experimento de Stern-Gerlach, já foi determinado a magnitude do momento magnético devido ao momento angular do spin, por meio de observações das deflexões de átomos de um único elétron. Temos que o spin do elétron pode assumir valores de  $\pm \frac{1}{2}$ , a expressão para  $\vec{\mu}_s$  é conhecida, onde descrevemos através do magnetão de Bohr:

$$\mu_s = -g_s \mu_B m_s, \quad \text{sendo} \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}. \quad (2.10)$$



O termo  $m_s$  são os possíveis valores de spin ( $\pm 1/2$ ),  $g_s$  é um fator presente no momento magnético, sendo igual a aproximadamente 2. Com isso, as energias que temos no nosso hamiltoniano são:

$$H = g_s \mu_B m_s B_z = \pm \mu_B B_z \longrightarrow \pm \left( \frac{Z^4}{n^5} \right) \cdot \frac{\mu_0 \alpha c e^2 \hbar}{8\pi a_0^2 m_e}. \quad (2.11)$$

A informação importante que podemos obter dessas energias é que há uma quebra de degenerescência da energia devido a interação SO, o elétron pode apenas estar em  $+\mu_B B_z$  ou em  $-\mu_B B_z$ , entre essas duas energias temos uma região proibida de energia, um  $gap(\Delta)$ , cujo valor é a diferença de energia entre os estados:

$$\Delta = +\mu_B B_z - (-\mu_B B_z) = 2\mu_B B_z = \left( \frac{Z^4}{n^5} \right) \cdot \frac{\mu_0 \alpha c e^2 \hbar}{4\pi a_0^2 m_e}. \quad (2.12)$$

Em suma, podemos concluir que quando incluímos a interação spin-órbita em um sistema, iremos quebrar a degenerescência das energias da banda, isso é mais notável onde podemos achar trechos da banda de energia que são degenerados, como os cones de Dirac. Um exemplo é o próprio grafeno, o motivo da frustração da proposta de Kane-Mele é que ao incluir o efeito SO poderia tornar o grafeno um IT de spin, porém o  $gap$  medido era muito pequeno para isso ser possível. Apesar da frustração, nota-se na equação (2.12) que há uma dependência do  $gap$  com o número atômico  $Z$ , o que torna compreensível o porquê da comunidade de física de estado sólido se engajarem tanto em uma busca de novos materiais candidatos à IT's de spin com número atômico maior que o do Carbono.

## 2.4 SILICENO

O siliceno é um isolante topológico [37–39], é um material 2D composto de átomos de silício, um semi-condutor natural. O material possui ordenamento cristalino muito semelhante ao grafeno, sendo uma estrutura do tipo *honeycomb*. Sua estrutura, assim como o grafeno, é descrita através de duas sub-redes triangulares, a diferença é que no siliceno, as sub-redes não compartilham o mesmo plano, sendo distorcida, como vemos na figura (2.7).

Essa distorção é devido a seu grande raio iônico, que também, consequentemente, gera um efeito SO relativamente grande, com um  $gap$  da ordem de  $1.55 meV$  [40, 41].

Como visto na seção (2.3) é esperado que após a frustração do grafeno, o silício fosse um bom candidato para estudar um possível IT de spin, pois ele está contido na mesma família  $IV - A$  da tabela periódica, a mesma do carbono. O siliceno é um IT com um  $gap$  grande o suficiente para tratarmos com o ESHQ como no modelo de Kane-Mele. No trabalho de M. Ezawa [39], é mostrado que podemos controlar os estados metálicos de

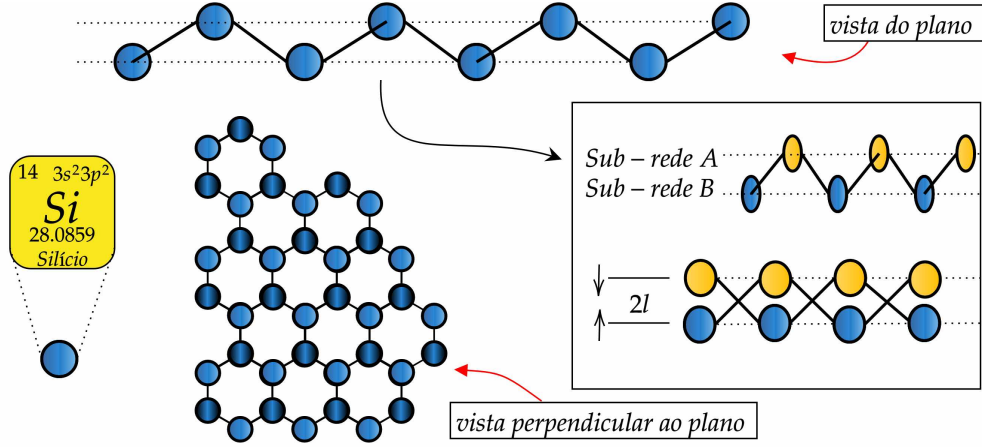


Figura 2.7 – Estrutura da rede do siliceno.

borda do siliceno, ou seja, controlar o *gap* através de um campo elétrico  $E_z$  perpendicular à uma nano-fita de siliceno do tipo *zig-zag*, que gera uma diferença de potencial entre os átomos das sub-redes  $A$  e  $B$  de  $\Delta V = 2lE_z$ .

Vamos estudar posteriormente a estrutura eletrônica do siliceno através do modelo de aproximação *tight-binding*, este é descrito para até os segundos vizinhos, para mais detalhes veja o artigo [40]. Em nosso estudo não envolveremos o efeito Rashba. O hamiltoniano do nosso sistema é:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} + \ell \sum_{i\alpha} \zeta_i E_z c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}. \quad (2.13)$$

O primeiro termo do hamiltoniano é o que representa o *hopping* dos primeiros vizinhos em nossa rede, para o siliceno  $t = 1.6eV$ . A soma é efetuada em pares  $\langle i, j \rangle$  nos sítios dos primeiros vizinhos, em que  $c_{i\alpha}^\dagger$  cria um elétron com polarização de spin  $\alpha$  no sítio  $i$  e  $c_{j\alpha}$  aniquila um elétron com polarização spin  $\sigma$  no sítio  $j$ . O segundo termo remete ao acoplamento SO do siliceno  $\lambda_{SO}$  cujo valor é de  $3.9meV$ , a soma é efetuada em pares  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  nos segundos vizinhos, o termo  $\nu_{ij}$  assume valores  $\pm 1$ ,  $-1$  se o *hopping* dos segundos vizinhos for no sentido horário e  $+1$  se for anti-horário,  $\sigma^z$  é a componente  $z$  da matriz de Pauli. O terceiro termo é devido a presença de uma diferença de potencial entre as duas sub-redes ao ligar o campo elétrico  $E_z(x, y)$ ,  $2l$  é a separação das sub-redes em que  $l = 0.23\text{\AA}$ , o termo  $\zeta$  assume valores  $\pm 1$ ,  $+1$  para a sub-rede  $A$  e  $-1$  para a sub-rede  $B$ .

No trabalho de Ezawa [40], também é diagonalizada a Hamiltoniana efetiva utilizando teoria de baixas energias de Dirac, a expressão do *gap* nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  do siliceno é:

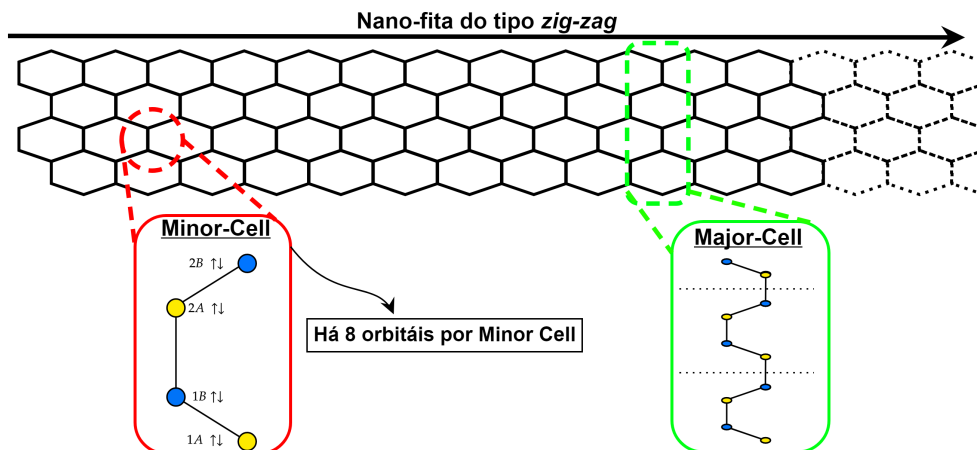
$$\Delta(E_z) = 2|lE_z - \eta s_z \lambda_{SO}|. \quad (2.14)$$

O termo  $s_z = \pm 1$  refere-se ao spin possível do elétron, o termo  $\eta = \pm 1$  está relacionado aos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , onde temos os cones de Dirac contendo polarização de helicoidais de spin, sendo  $+1$  para os pontos  $\mathbf{K}$  e  $-1$  para os pontos  $\mathbf{K}'$ . Da equação (2.14), é possível

notar que o *gap* se fecha quando  $E_z = \pm E_c$ , onde  $E_c = \lambda_{SO}/l$ , em que ao alcançar o campo elétrico crítico, o siliceno se torna um semimetal sem *gap* como o grafeno. Para os elétrons de spin pra cima ( $s_z = +1$ ), eles não sentiram a presença de *gap* no ponto  $\mathbf{K}(\eta = +1)$ , como também, quando tratarmos de um elétron com spin pra baixo ( $s_z = -1$ ), ele não sentirá um *gap* no ponto  $\mathbf{K}'(\eta = -1)$ , caso contrário temos um *gap* de  $4\lambda_{SO}$ . Isso implica que os spins estão totalmente polarizados para cima em  $\mathbf{K}$  e para baixo em  $\mathbf{K}'$ , temos então, estados de borda com spin polarizados.

## 2.5 NANO-FITAS

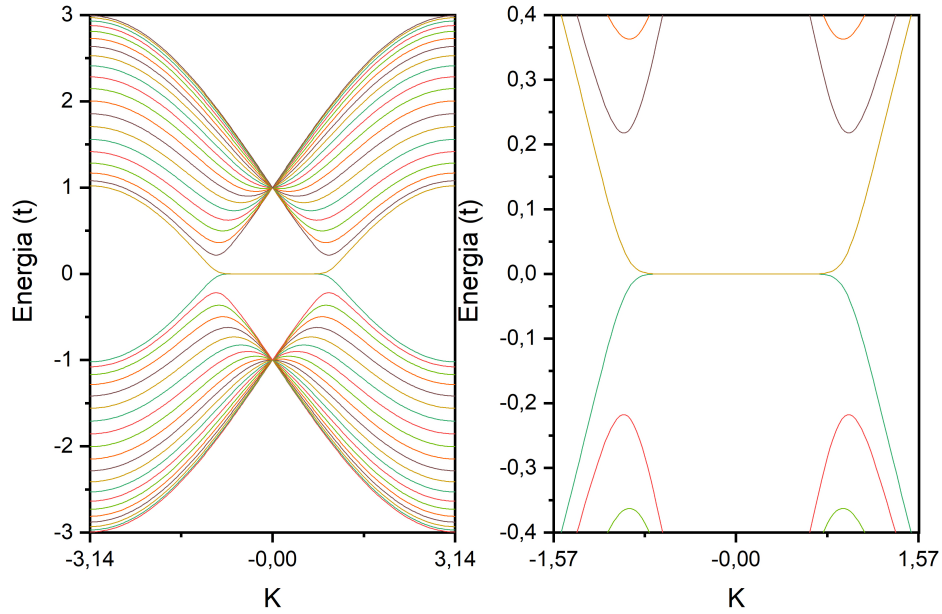
As nano-fitas são estruturas periódicas com um átomo de espessura, portanto são bidimensionais. O que as tornam interessantes para nosso estudo é que as nano-fitas estão muito presentes em estudos voltados à spintrônica e dispositivos derivados. Estamos interessado nas nano-fitas do tipo *zig-zag* [42], como segue a figura (2.8):



**Figura 2.8** – Esquema de uma nano-fita *zig-zag*.

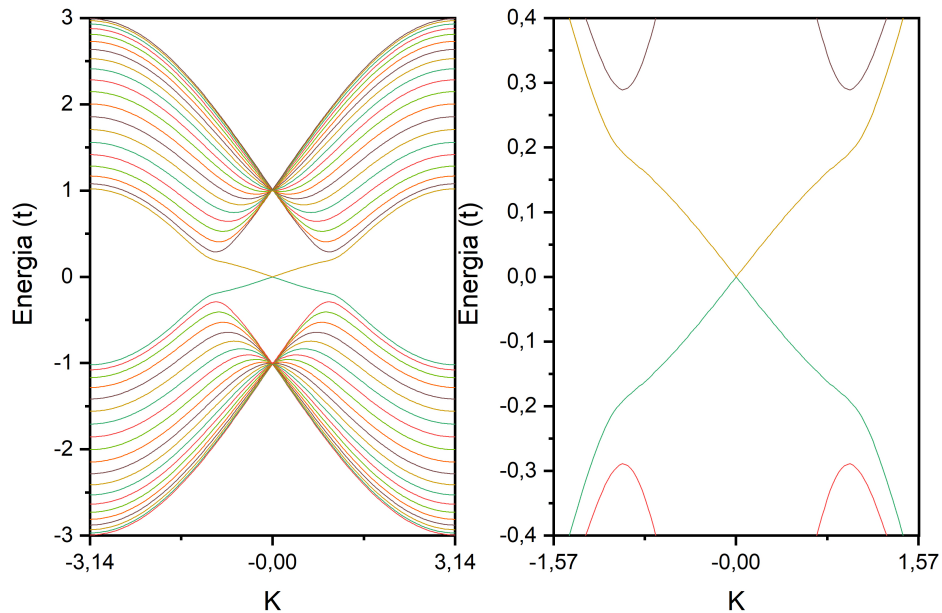
Nesta monografia, através de linguagem computacional *Fortran 90*, foi elaborado o método *tight – binding* para nano-fitas de siliceno e grafeno, como veremos nas imagens a seguir. Os parâmetros variáveis são o acoplamento SO ( $\lambda_{SO}$ ) e o campo elétrico ( $E_z$ ). Será usada uma nano-fita constituída de 40 sítios, portanto, teremos 80 orbitais ao todo, nossa unidade de energia será o termo de *hopping*, portanto  $t = 1$ . É importante mencionar que o usuário que manipular o programa pode posteriormente substituir  $t$  pelo valor apropriado (em  $eV$ , por exemplo) ao material de interesse.

Na figura (2.9) temos a nano-fita de grafeno. Como já é sabido, o spin-órbita do grafeno é minúsculo, portanto o termo  $\lambda_{SO} = 0$ . Para o grafeno o campo  $E_z$  não foi ligado, o que resta é apenas o parâmetro de *hopping* sendo padrão em todas simulações ( $t = 1$ ). É sabido que não há *gap* em uma nano-fita *zig-zag* de grafeno [43].



**Figura 2.9** – Espectro de energia da nano-fita *zig-zag* de grafeno.

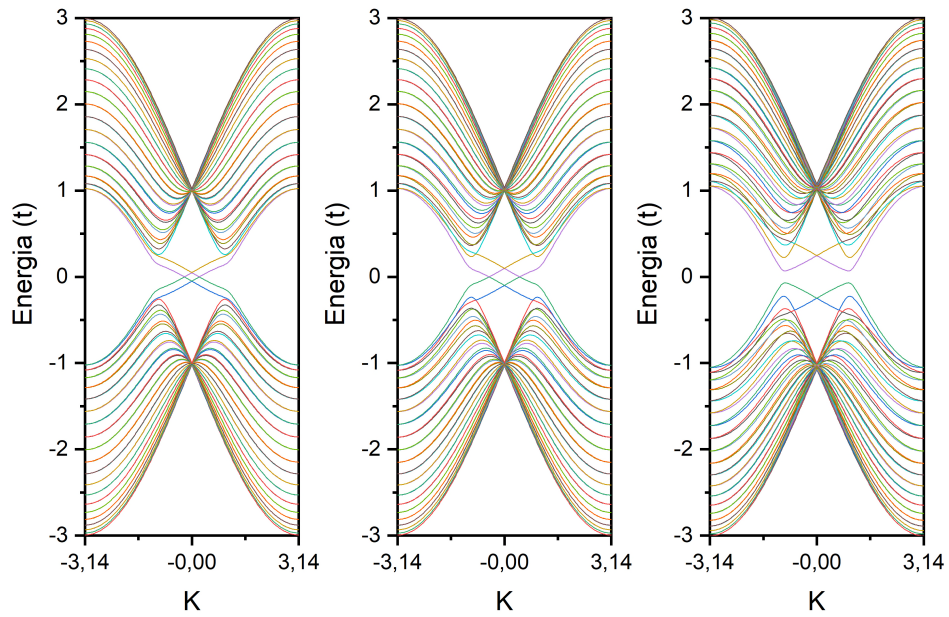
Na figura (2.10) temos o espectro de energia de uma nano-fita *zig-zag* de siliceno. Sua interação SO é grande o suficiente para alterar a estrutura de bandas da fita, nesta simulação seu parâmetro é  $\lambda_{SO} = 0.2$ . O campo elétrico está desligado  $E_z = 0$ .



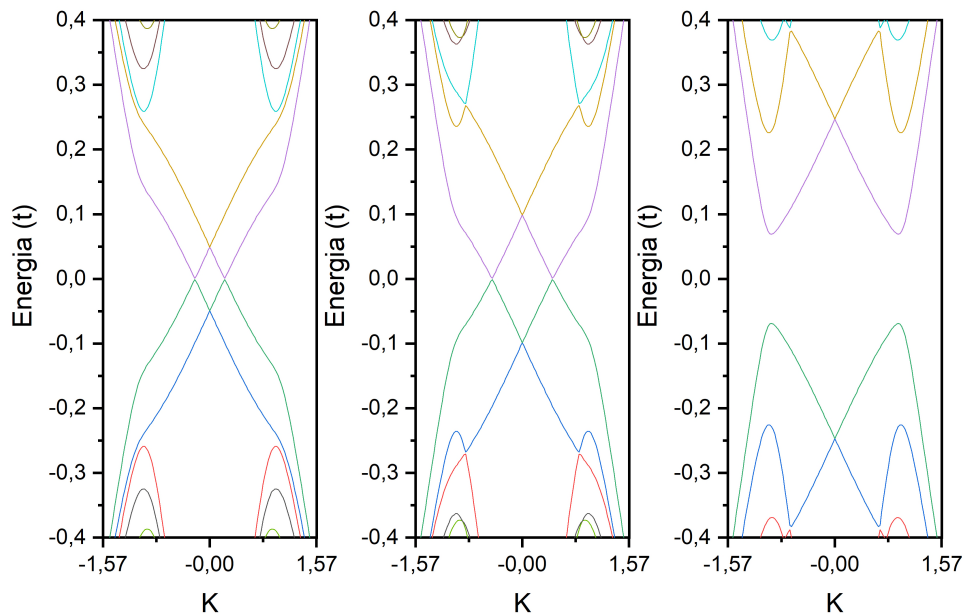
**Figura 2.10** – Espectro de energia da nano-fita *zig-zag* de siliceno.

Na figura (2.11), temos resultados para os mesmos parâmetros que na figura (2.10), porém agora o campo elétrico é diferente de zero. Em ordem temos,  $|E_z| < \lambda_{SO}$ ,  $|E_z| = \lambda_{SO}$

e  $|E_z| > \lambda_{SO}$ , sendo respectivamente  $|E_z| = \{0.1; 0.2; 0.3\}$ .



**Figura 2.11** – Espectro da nano-fita *zig-zag* de siliceno com a presença de um campo  $E_z$ .



**Figura 2.12** – Transição do isolante não trivial para um trivial.

Aqui devemos alertar o leitor a um erro comum na descrição dos resultados das figuras (2.9) a (2.12): temos que tomar o cuidado de diferenciar o espectro do *bulk*, que é um sistema bi-dimensional (2d) infinito, ou seja, uma folha de grafeno ou siliceno com condições de contorno periódicas em ambas as direções, e que portanto **não** possui bordas,

ou *boundaries*, e a fita em si, que é um sistema quasi-unidimensional (quasi-1D), com condição de contorno periódica em uma direção e condição de contorno **aberta** na outra direção, aonde, obviamente, estão localizadas as bordas.

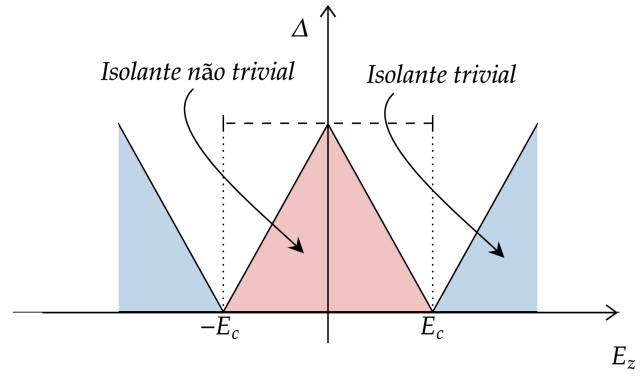
A presença ou não do gap no espectro de energia, com a consequente determinação da topologia trivial ou não do modelo, é investigada, através do cálculo do invariante topológico ( $Z_2$ , no nosso caso), no sistema bi-dimensional, e **não** na fita. Por exemplo, a cada painel da figura (2.11) (e respectivos zooms na figura (2.12)), que apresenta o espectro de energia da fita (quasi-1d), corresponde a um espectro de energia do *bulk* (2D). Todos os espectros 2D, com exceção daquele para  $E_z = \lambda_{SO}$ , apresentam gap (portanto correspondem a isolantes). Já para os correspondentes espectros quasi-1D (fita), apenas aqueles para  $E_z > \lambda_{SO}$  apresentam gap.

O que o espectro do *bulk* (2D), seguido do cálculo do correspondente invariante topológico  $Z_2$ , nos informa o seguinte:

- (i) Se o espectro de *bulk* (2D) tem gap e  $Z_2 = 1$ , o espectro da fita (quasi-1D) **tem** que ser metálico, sendo que os estados metálicos **estão** localizados na borda e **têm** propriedades “interessantes”. No nosso caso, a propriedade interessante é que tais estados apresentam *spin-momentum locking* (“polarização” de spin) que é “protegida” pelas simetrias do *bulk*. Ou seja, perturbações (tais como interação elétron-elétron, desordem, etc) que não quebrem as simetrias discretas do *bulk* (reversão-temporal e quiral) **não** podem afetar as propriedades interessantes dos estados de borda.
- (ii) se o espectro de *bulk* (2D) tem gap e  $Z_2 = 0$ , temos duas possibilidades para o espectro da fita (quasi-1D): ele pode apresentar gap (portanto, os estados de borda sumiram), que é o nosso caso para o painel do lado direito ( $E_z > \lambda_{SO}$ ), ou o espectro pode ser metálico, apresentando estados de borda, mas tais estados serão triviais, no sentido de que eles **não** apresentam propriedades interessantes. Tais estados são conhecidos desde os anos 1930 e são chamados estados de superfície de Shockley [44] e Tamm [45].

A teoria de transição de fase topológica indica [28] que o invariante topológico ( $Z_2$ , no nosso caso) só pode variar, quando variamos algum parâmetro do Hamiltoniano (o campo elétrico, no nosso caso) se houver “mudança” das bandas de valência (com as quais o invariante topológico é calculado). Para que isso ocorra, de maneira adiabática (suave), temos que “trocar” uma banda de valência com uma de condução. No momento da troca tais bandas de valência e a de condução estão ambas na energia de Fermi, portanto o sistema *bulk* se torna metálico. No nosso caso, isso ocorre **apenas** para  $E_z = \lambda_{SO}$ . O sistema se torna isolante novamente para  $E_z > \lambda_{SO}$ , porém, como agora  $Z_2 = 0$ , ele se

torna topologicamente trivial, e a fita (quasi-1d) não mais apresenta estados metálicos de borda, como podemos ver na figura (2.13) a seguir.



**Figura 2.13** – Domínio onde temos um comportamento trivial e não trivial.



### 3 TRANSIÇÕES DE FASE

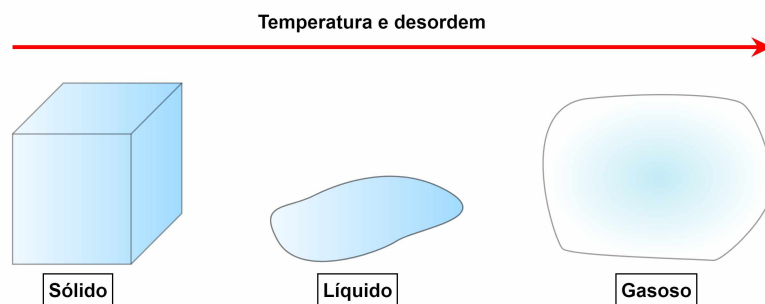
O que são transições de fase? Uma concepção comum que vemos classicamente são os exemplos onde temos mudança de um ordenamento de um material para um estado cuja as características físicas mudam, como o gelo que derreteu e se tornou água líquida.

- **O que é uma fase?**

Essa é uma questão interessante para pontuar neste capítulo. Podemos dizer que no estado de equilíbrio da matéria, suas características são mantidas estáveis através de uma mudança pequena de algum parâmetro do sistema. Dentro de uma fase, temos que os potenciais termodinâmicos variam de um modo analítico. As fases são caracterizadas através de suas simetrias, cada sistema terá a sua, portanto fases diferentes são separadas por transições, um exemplo é notarmos quais simetrias temos em um sólido e deixamos de ter para um líquido.

- **Com entender uma transição de fase?**

Quando temos uma transição de fase, o sistema se torna instável para variações infinitesimais de parâmetros externos, isso demonstra que podemos encontrar um comportamento não analítico do potencial termodinâmico quando descrito pelos parâmetros do nosso sistema. As transições de fase térmicas são as mais comumente conhecidas. Como esperado, elas ocorrem quando variamos a temperatura de nosso sistema. No caso, as transições de fase envolvendo fenômenos térmicos ocorrem normalmente de sistemas contidos em uma fase de baixas temperaturas para uma fase desordenada e temperatura alta, onde a ordem do sistema diminuiu devido ao aumento de temperatura, como vemos na figura (3.1).



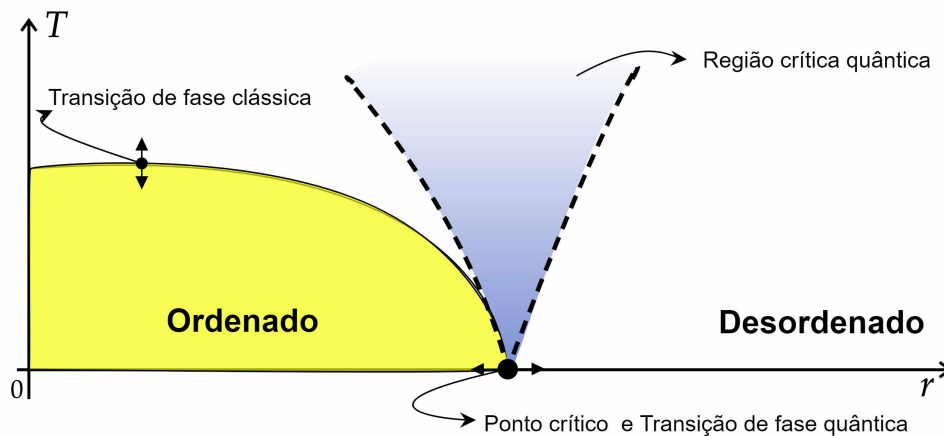
**Figura 3.1** – Exemplo de transições sólido para líquido, líquido para gasoso.



- **Transição de fase quântica?**

A transição de fase quântica é o foco neste capítulo, elas ocorrem em  $T = 0$ , portanto nosso parâmetro a ser variado é termicamente independente. Em uma transição de fase quântica, temos o comportamento não analítico da energia de Fermi em função do parâmetro de controle. Como não há flutuações térmicas em  $T = 0$ , o que temos são as flutuações quânticas que assumem esse papel. Para  $T$  igual 0, um sistema quântico é descrito como uma função de onda com uma única fase coerente.

A temperatura  $T = 0$  não é algo que podemos acessar experimentalmente, porém aqui consideramos um diagrama de fase “quântico crítico” como função do parâmetro de controle do sistema  $r$  e a temperatura  $T$ , como vemos na figura (3.2).



**Figura 3.2** – Diagrama de fase de uma transição de fase quântica.

Em uma transição de fase quântica (TFQ) contínua, em  $T = 0$  temos que o diagrama é dividido em duas regiões por um ponto crítico quântico (PCQ). Há dois regimes estáveis para pequenas temperaturas, em que na região crítica em azul, podemos acessar estados exóticos a temperaturas elevadas, para mais detalhes sobre transições de fase quânticas, veja a referência completa [46].

Ao aumentar a temperatura partindo do PCQ, será possível obter observáveis termodinâmicos em função da temperatura, esta tendo um comportamento de lei de potência com expoentes não triviais (veja a referência [47]). Esses termos em potência são experimentalmente acessíveis, sendo uma “assinatura” de um fenômeno crítico.

### 3.1 FENÔMENOS CRÍTICOS

O parâmetro de ordem (PO) de um sistema é um observável. O chamaremos de  $\varphi$ , podemos o definir como:

$$\langle \varphi \rangle \begin{cases} = 0 & \text{se em uma fase desordenada} \\ \neq 0 & \text{se em uma fase ordenada} \end{cases} \quad (3.1)$$

O bra-ket refere-se a uma média termodinâmica para um devido *ensemble* de Gibbs (sistema clássico), já para um sistema quântico significa um valor esperado.

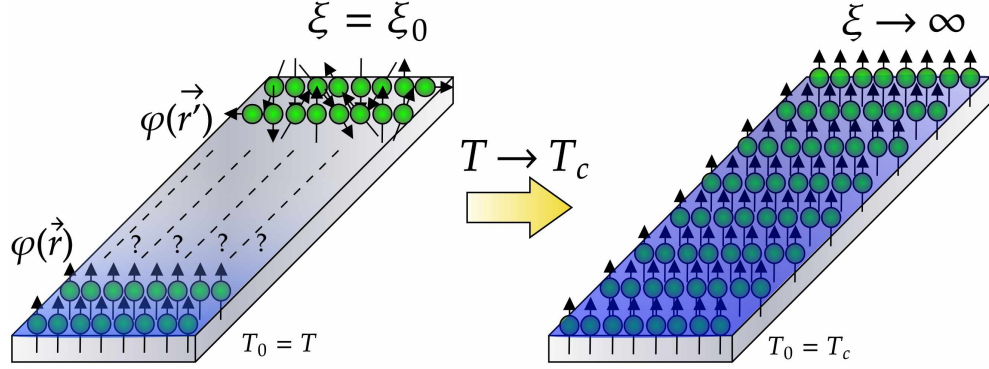
Normalmente o PO é escolhido como um observável local, em que “local” implica que  $\varphi$  pode ser definido em qualquer ponto no espaço. Por exemplo, para materiais ferromagnéticos, o parâmetro de ordem é a magnetização local. Em geral, podemos estudar inúmero parâmetros, porém nem sempre ele será interessante para estudarmos um fenômeno de transição, alguns sistemas físicos podem até não ter conhecidos seus parâmetros de ordem.

Se um parâmetro de ordem for descrito através do tempo e por um termo espacial, isto é,  $\psi = \psi(\vec{r}, t)$ , a correlação de  $\psi$  pode ser definida como  $\langle \psi(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}', t') \rangle$ . Para sistemas onde temos fases estáveis, portanto, independente do tempo, a função de correlação do parâmetro de ordem pode ser definida como:

$$\langle \varphi(\vec{r}) \varphi(\vec{r}') \rangle - \langle \varphi(\vec{r}) \rangle \langle \varphi(\vec{r}') \rangle \propto e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\xi}}, \quad (3.2)$$

onde  $\xi$  é o comprimento de correlação do sistema. Quando estamos perto de um transição de fase, ou seja, alcançando um ponto crítico,  $\xi$  diverge para o infinito. Perto de pontos críticos o comprimento de correlação é a única escala de comprimento que caracteriza a física de sistemas de baixas energias. Podemos ter uma noção intuitiva do que é  $\xi$  na figura (3.3).

Na figura (3.3) temos o exemplo de um sistema em que temos um ordenamento de spins local, em outras palavras, tirando esse elemento local, os spins dos elétrons não se correlacionam, podemos imaginar que isso seja um material paramagnético. Quando vamos retirando energia do sistema, ou seja, diminuindo a temperatura até chegar em uma temperatura crítica  $T_c$ , vamos forçar os elétrons vizinhos a escolherem um ordenamento específico. Os elétrons próximos começam a se ordenar igualmente, de modo que no final, todo sistema tem um ordenamento único de spin, o material sofreu uma transição de fase e se tornou ferromagnético. Em suma, podemos ter uma breve ideia que  $\xi$  é um parâmetro que nos diz o quanto o sistema se enxerga ou interage consigo mesmo, o quanto está correlacionado, de modo que quando temos uma divergência onde  $\xi \rightarrow \infty$ , podemos dizer que os spins da borda inferior da placa se correlacionam com os da borda superior, independente do tamanho da placa.



**Figura 3.3** – Exemplo sobre o que é o comprimento de correlação  $\xi$ .

Como vimos na seção anterior, em específico na figura (2.12), para um dado campo elétrico, o siliceno deixa de ser um isolante não trivial e se torna um isolante trivial (isolante de banda), e surge a questão: como podemos estudar esta transição usando conceitos de fenômenos críticos? Podemos ver no artigo de um de nossos colaboradores de pesquisa [48], para tratarmos a transição como um fenômeno crítico genuíno, é importante a existência de um comprimento de correlação  $\xi$  que diverge nesta transição. Podemos descrever o comprimento de correlação como:

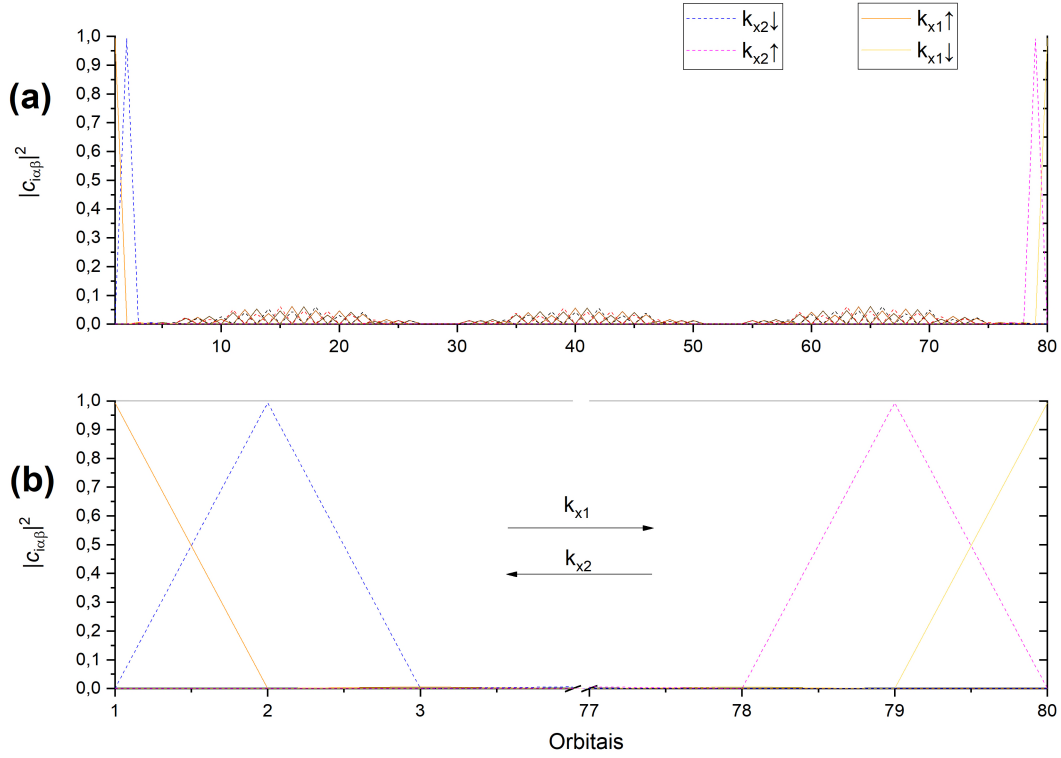
$$\xi = \xi_0 |g|^{-\nu}, \quad (3.3)$$

onde  $\xi_0$  é o comprimento de correlação natural do sistema,  $g$  é nosso parâmetro de controle. Em nosso caso  $g = |E - E_c|$ , que zera quando alcançamos o campo elétrico crítico,  $\nu$  é expoente do comprimento de correlação.

Para entendermos melhor a motivação, vamos voltar às simulações do capítulo anterior e observar a figura (3.4) na próxima página.

Como é possível ver na figura (3.4-b), temos que os estados de borda de uma fita *zig-zag* de siliceno (para  $E_z = 0$ ) são perfeitamente localizados nos sítios extremos de cada borda da fita (considerada infinita ao longo de seu eixo de simetria). Na figura (3.4) temos no eixo vertical o coeficiente quadrado, como função da posição do sítio na direção perpendicular ao eixo da fita. Vemos que  $|c_\alpha|^2$  é 1 para o primeiro sítio e zero para todos os outros sítios. Sendo que este estado está associado a uma única polarização de spin. Um estado de borda com polarização oposta de spin se propaga na direção contrária e seus  $|c_\beta|^2$  possuem a mesma propriedade descrita acima, ou seja, tal estado é também perfeitamente localizado nos sítios da mesma borda.

Uma vez que o campo elétrico é “ligado” em nosso hamiltoniano descrito na equação (2.13), sabemos que o gap de um sistema 2d (infinito) de siliceno se comportará de acordo com a equação (2.14), ou seja, o gap aumenta para uma polarização de spin, e diminui para



**Figura 3.4** – Plotagem dos coeficientes  $c_{i\alpha\beta}$  do siliceno para  $\lambda_{SO} = 0.2$  e  $E_z = 0$ .

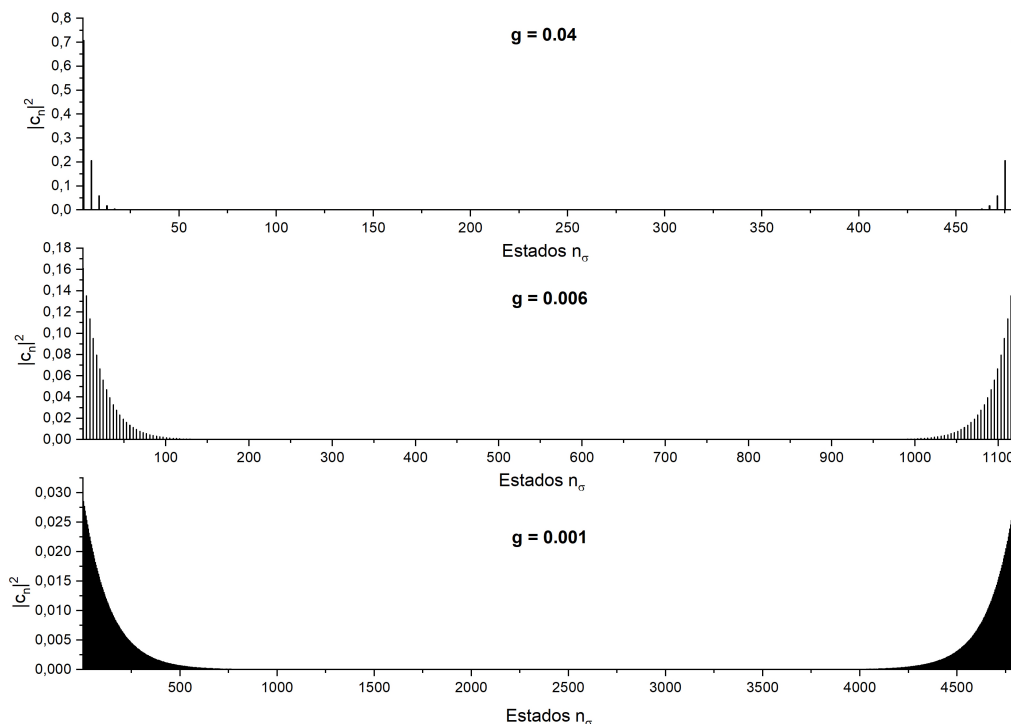
a outra, em um dos pontos  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$ , ocorrendo o inverso no ponto oposto. O importante é que o gap se fechará para um valor crítico do campo elétrico  $E_c$ , sendo este  $E_c = \lambda_{SO}/l$ . Para valores de campo acima deste valor crítico o gap se abre novamente.

É sabido [39] que o siliceno para  $E > E_c$  e para  $E < E_c$  tem propriedades topológicas diferentes. Este último é não trivial, enquanto o primeiro é trivial (chamado isolante de banda), ou seja, não possui polarização de spin nos estados de borda que seja protegida por simetria (inversão temporal), caso  $E \sim E_c$ , podendo acontecer que a fita deixe de ser metálica, como é caso das figuras (2.11-c) e (2.11-c).

No que segue, vamos usar as fitas *zig-zag* de siliceno sob campo elétrico externo para analisar a proposta [48] de que a penetração dos estados de borda aumenta conforme nos aproximamos de uma transição de fase topológica, no nosso caso, quando  $E \rightarrow E_c$ , temos uma “assinatura” dos fenômenos críticos associados a uma transição de fase quântica, como descrito em [46].

## 4 RESULTADOS

Na figura seguinte (4.1) mostramos como mudam os resultados da figura (3.4) para  $E = 0$ , quando “ligamos” o campo elétrico.



**Figura 4.1** – O comportamento dos estados de borda quando  $\xi \rightarrow \infty$ .

Note na figura (4.1) que a largura da fita *zig-zag* aumenta substancialmente conforme  $g$  diminui. Dessa maneira evitamos os chamados efeitos de tamanho finito no cálculo do coeficiente  $\nu$ . Usando a notação comum em fenômenos críticos,  $g = E - E_c$ , mostramos resultados de  $|c_n|^2$  vs  $n$  para os seguintes valores de  $g = [0.04; 0.006; 0.001]$ . Vemos claramente nas figuras que conforme nos aproximamos do ponto crítico ( $g \rightarrow 0$ ) o estado de borda penetra para dentro da fita. É claro que, para evitar efeitos de “tamanho finito”, ou seja, para que a presença da outra borda não “contamine” a penetração, temos que tomar fitas cada vez mais largas conforme  $g$  tende a zero (tomamos uma fita com 2400 sítios para  $g = 0.001$ ), note que o valor máximo de  $n$  nas figuras é o dobro do número de sítios. Isso ocorre por conta do spin  $\sigma$ . Fazemos então um ajuste numérico seguindo a equação:

$$|c_n|^2 = Ae^{-n/\xi}, \quad (4.1)$$

A densidade de probabilidade é dada por  $|c_n|^2$  em função da distância ao ponto

crítico  $g = E - E_c$  e da posição  $n$  dos sítios da fita de Siliceno, onde  $E$  é o campo elétrico e  $E_c$  é o campo crítico.

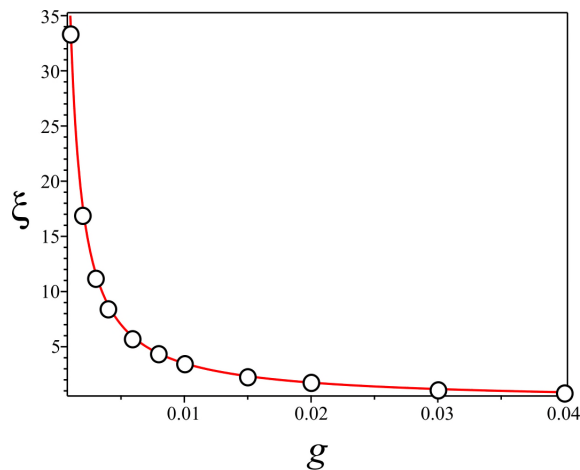
Primeiramente, calculamos numericamente a densidade de probabilidade ( $n = 2400$  sítios) como função da posição, e para os seguintes valores de  $g = 0.001, 0.002, 0.003, 0.004, 0.006, 0.008, 0.01, 0.015, 0.02, 0.03, 0.04$  (distancia ao ponto crítico). Realizando um procedimento de ajuste de curva (Origin Pro 2018), encontramos que a densidade de probabilidade  $|c_n|^2$  possui a seguinte forma de decaimento exponencial com relação a posição  $n$  dos sítios da fita.

$$|c_n|^2 = Ae^{-n\xi}, \quad (4.2)$$

onde  $A(g)$  e  $\xi(g)$  são funções de  $g$ . Note que  $\xi$  é o comprimento de penetração dos estados de borda. O ajuste de curva fornece os valores numéricos de  $A(g)$  e  $\xi(g)$ . Abaixo, mostramos apenas os valores de  $\xi$  como função de  $g$ .

$g$	0.001	0.002	0.003	0.004	0.006	0.008	0.01	0.015	0.02	0.03	0.04
$\xi$	33.437	16.778	11.233	8.453	5.666	4.264	3.419	2.284	1.716	1.115	0.806

A tabela acima representa o comprimento de penetração  $\xi$  (segunda linha) como função da distância ao ponto crítico  $g$  (primeira linha). Por meio da tabela acima, obtemos os círculos da figura (4.2).



**Figura 4.2** – Comprimento de penetração  $\xi$  dos estados de borda com energia zero como função da distância ao ponto crítico  $g = E - E_c$ .

Para obter a equação que melhor descreve os círculos da figura (4.2) realizamos um simples ajuste de curva nos pontos da tabela acima. O ajuste de curva fornece a linha vermelha da figura (4.2), onde essa linha vermelha é descrita pela seguinte função

$$\xi = 0.035(E - E_c)^{-\nu}, \quad (4.3)$$

onde  $\nu = 1$ ,  $E$  é o campo elétrico e  $E_c$  é o campo crítico.

Trabalhos recentes [49], mostraram que quando o comprimento de penetração  $\xi$  diverge como na equação anterior, podemos associar o comprimento de penetração  $\xi$  (dos estados de borda) ao comprimento de correlação espacial próximo da transição de fase e identificar  $\nu$  como sendo o expoente crítico de correlação espacial próximo a transição de fase quântica topológica.

O procedimento acima é importante porque nos permite classificar o modelo dentro de uma classe de universalidade, já que essa classificação depende dos expoentes críticos. O valor de  $\nu$  previsto pela teoria de fenômenos críticos para transições de fase quântica é  $\nu = 1$ , nosso valor obtido para  $\nu$  foi 1, com uma margem de erro de 0.01%, portanto, o resultado que obtivemos está perfeitamente de acordo com a teoria, indicando que o comprimento de penetração do estado de borda pode servir como comprimento de correlação espacial.

## 5 CONCLUSÕES

Ao longo desta monografia foi realizado um grande levantamento de estudos sobre conceitos importantes para a compreensão de física de estado sólido. Como também foi devidamente explorado conceitos históricos que levou do efeito Hall até o princípio dos isolantes topológicos. Com grande empenho ao estudar as nano-fitas de siliceno foi possível discutir um sistema aplicável experimentalmente. O siliceno é um sistema real sendo reproduzível em laboratório, ele representa a realização direta do modelo de Kane-Mele [21], sendo portanto ideal para a análise das propriedades topológicas não triviais de um sistema bidimensional: correspondência volume-borda, estados de borda helicais (com polarização de spin), propriedades protegidas por simetrias do volume, e muitas mais. O fato de que um campo elétrico perpendicular ao plano do siliceno produz uma transição de fase quântica (não trivial para trivial) nos permitiu analisar como a teoria de fenômenos críticos pode ser usada para entender tal transição em uma fita *zig-zag* de siliceno. Mostramos, como proposto por colaboradores do nosso grupo [48], que o comprimento de penetração do estado de borda, como função da “distância”  $g$  ao ponto crítico ( $g = E_c - E$ ), pode ser usado como uma “assinatura” das propriedades críticas de tal transição. Esperamos, como continuação deste projeto, aplicar as técnicas aqui desenvolvidas a sistemas diferentes: nanotubos de siliceno, fitas desordenadas e sistemas interagentes, verificando como tais fatores afetam as propriedades do sistema nas imediações da transição de fase topológica.



## REFERÊNCIAS

- [1] E. H. Hall. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, 2(3):287–292, 1879.
- [2] E. H. Hall. Xviii. on the “rotational coefficient” in nickel and cobalt. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 12(74):157–172, 1881.
- [3] D. Carpentier. Topology of bands in solids: From insulators to dirac matter. *Séminaire Poincaré XVIII*, pages 87–118, 2014.
- [4] Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeki Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong. Anomalous hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1539–1592, May 2010.
- [5] Robert Karplus and J. M. Luttinger. Hall effect in ferromagnetics. *Phys. Rev.*, 95:1154–1160, Sep 1954.
- [6] Ming-Che Chang and Qian Niu. Berry phase, hyperorbits, and the hofstadter spectrum. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1348–1351, Aug 1995.
- [7] Di Xiao, Ming-Che Chang, and Qian Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1959–2007, Jul 2010.
- [8] Shun-Qing Shen. Spin transverse force on spin current in an electric field. *Phys. Rev. Lett.*, 95:187203, Oct 2005.
- [9] P. Drude. Zur elektronentheorie der metalle. *Annalen der Physik*, 306(3):566–613, 1900.
- [10] M.I. Dyakonov and V.I. Perel. Possibility of orienting electron spin with current. *ZhETF*, 13(11):657–660, 1971.
- [11] M.I. Dyakonov and V.I. Perel. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, 35(6):459 – 460, 1971.
- [12] J. E. Hirsch. Spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1834–1837, Aug 1999.
- [13] Shuichi Murakami, Naoto Nagaosa, and Shou-Cheng Zhang. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, 301(5638):1348–1351, 2003.
- [14] Jairo Sinova, Dimitrie Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald. Universal intrinsic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 92:126603, Mar 2004.

- [15] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494–497, Aug 1980.
- [16] B. I. Halperin. Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Phys. Rev. B*, 25:2185–2190, Feb 1982.
- [17] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [18] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- [19] T. Jungwirth, Qian Niu, and A. H. MacDonald. Anomalous hall effect in ferromagnetic semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 88:207208, May 2002.
- [20] Cui-Zu Chang, Jinsong Zhang, Xiao Feng, Jie Shen, Zuo Cheng Zhang, Minghua Guo, Kang Li, Yunbo Ou, Pang Wei, Li-Li Wang, Zhong-Qing Ji, Yang Feng, Shuaihua Ji, Xi Chen, Jinfeng Jia, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Ke He, Yayu Wang, Li Lu, Xu-Cun Ma, and Qi-Kun Xue. Experimental observation of the quantum anomalous hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 340(6129):167–170, 2013.
- [21] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95:226801, Nov 2005.
- [22] C. L. Kane and E. J. Mele.  $Z_2$  topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005.
- [23] Hans Lüth (auth.) Harald Ibach. *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*. Advanced Texts in Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 4 edition, 2009.
- [24] N. David Mermin Neil W.(Neil W. Ashcroft) Ashcroft. *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1 edition, 1976.
- [25] J. J. Sakurai. *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley Pub. Co, rev. ed edition, 1994.
- [26] M. Zahid Hasan and Joel E. Moore. Three-dimensional topological insulators. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2(1):55–78, 2011.

- [27] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [28] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- [29] Yoichi Ando. Topological insulator materials. *Journal of the Physical Society of Japan*, 82(10):102001, 2013.
- [30] Burkard Group. University of Konstanz. Berry phase, chern number, 2015. <https://theorie.physik.uni-konstanz.de/burkard/sites/default/files/ts15/Berry-phase.pdf>, Last accessed on 2019-11-28.
- [31] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [32] Philip Phillips. Mottness. *Annals of Physics*, 321(7):1634 – 1650, 2006. July 2006 Special Issue.
- [33] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, Jan 2009.
- [34] Shun-Qing Shen. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2013 edition, 2013.
- [35] J. Sichau, M. Prada, T. Anlauf, T. J. Lyon, B. Bosnjak, L. Tiemann, and R. H. Blick. Resonance microwave measurements of an intrinsic spin-orbit coupling gap in graphene: A possible indication of a topological state. *Phys. Rev. Lett.*, 122:046403, Feb 2019.
- [36] David J. Griffiths. *Mecânica Quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011.
- [37] Motohiko Ezawa. Spin valleytronics in silicene: Quantum spin hall–quantum anomalous hall insulators and single-valley semimetals. *Phys. Rev. B*, 87:155415, Apr 2013.
- [38] Motohiko Ezawa. Valley-polarized metals and quantum anomalous hall effect in silicene. *Phys. Rev. Lett.*, 109:055502, Aug 2012.
- [39] Motohiko Ezawa. A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field. *New Journal of Physics*, 14(3):033003, mar 2012.
- [40] Cheng-Cheng Liu, Hua Jiang, and Yugui Yao. Low-energy effective hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin. *Phys. Rev. B*, 84:195430, Nov 2011.

- [41] Cheng-Cheng Liu, Wanxiang Feng, and Yugui Yao. Quantum spin hall effect in silicene and two-dimensional germanium. *Phys. Rev. Lett.*, 107:076802, Aug 2011.
- [42] M. Yagmurcukardes, F. M. Peeters, R. T. Senger, and H. Sahin. Nanoribbons: From fundamentals to state-of-the-art applications. *Applied Physics Reviews*, 3(4):041302, 2016.
- [43] Katsunori Wakabayashi, Ken ichi Sasaki, Takeshi Nakanishi, and Toshiaki Enoki. Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and Technology of Advanced Materials*, 11(5):054504, oct 2010.
- [44] William Shockley. On the surface states associated with a periodic potential. *Phys. Rev.*, 56:317–323, Aug 1939.
- [45] Igor Tamm. On the possible bound states of electrons on a crystal surface. *Phys. Z. Sowjetunion*, 1:733–735, 1932.
- [46] Thomas Vojta. Quantum phase transitions, 2000. arXiv:cond-mat/0010285.
- [47] Matthias Vojta. Thermal and quantum phase transitions ., 2015. [http://statphys15.inln.cnrs.fr/IMG/pdf/houches15\\_vojta.pdf](http://statphys15.inln.cnrs.fr/IMG/pdf/houches15_vojta.pdf),.
- [48] Mucio A. Continentino, Sabrina Rufo, and Griffith M. Rufo. Finite size effects in topological quantum phase transitions, 2019.
- [49] S. Rufo, Nei Lopes, Mucio A. Continentino, and M. A. R. Griffith. Multicritical behavior in topological phase transitions. *Phys. Rev. B*, 100:195432, Nov 2019.

## APÊNDICE A – TIGHT-BINDING GRAFENO

Neste apêndice, é discutido o método Tight-binding do grafeno, contendo apenas os primeiros vizinhos. Como visto na seção 1.2.2, sabemos como descrever os vetores da sub-rede  $A$  e sub-rede  $B$  da rede hexagonal, como também os vetores de sua rede recíproca:

$$\vec{\mathbf{a}}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \vec{\mathbf{a}}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \vec{\mathbf{b}}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}); \quad \vec{\mathbf{b}}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (\text{A.1})$$

Vamos definir o parâmetro de hopping entre os orbitais  $\phi_n(\vec{r} - \vec{R})$  e  $\phi_n(\vec{r})$ , onde  $\vec{R}$  representa um vetor da rede:

$$\langle \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) | H | \phi_n(\vec{r}) \rangle \equiv -t_n(\vec{R}) \quad (\text{A.2})$$

Usando o formalismo da segunda quantização, define-se um operador de criação  $c_n^\dagger(\vec{R})$  e de aniquilação  $c_n(\vec{R}')$ , que descrevem a criação ou aniquilação de elétrons no estado  $\phi_n(\vec{r} - \vec{R})$  e a destruição em seu estado  $\phi_n(\vec{r} - \vec{R}')$ . Com isso, podemos escrever o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = - \sum_{n, \vec{R}, \vec{R}'} t_n(\vec{R} - \vec{R}') c_n^\dagger(\vec{R}) c_n(\vec{R}'). \quad (\text{A.3})$$

Vamos definir os operadores de aniquilação dos elétrons localizados nos orbitais dos átomos  $A$  e  $B$  como:

$$A(\vec{R}), B(\vec{R}). \quad (\text{A.4})$$

Esses operadores devem satisfazer relações de anti-comutação, ou seja:

$$\begin{aligned} \{A(\vec{R}), A^\dagger(\vec{R}')\} &= \{B(\vec{R}), B^\dagger(\vec{R}')\} = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'}, \\ \{A(\vec{R}), A(\vec{R}')\} &= \{B(\vec{R}), B(\vec{R}')\} = \{A(\vec{R}), B(\vec{R}')\} = \{A(\vec{R}), B^\dagger(\vec{R}')\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Nota-se, que assim como vimos na figura (1.11), os átomos da sub-rede  $A$  tem como seus vizinhos os átomos da sub-rede  $B$ . Podemos reescrever o Hamiltoniano do tight-binding como:

$$H = -t \sum_{\langle \vec{R}, \vec{R}' \rangle} A^\dagger(\vec{R}) B(\vec{R}') + h.c = -t \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} A^\dagger(\vec{R}) B(\vec{R} + \vec{\delta}) + h.c \quad (\text{A.6})$$

O termo  $h.c$  refere-se ao hermitiano conjugado. Os vetores  $\vec{\delta}$  são os que conectam os átomos da sub-rede  $A$  com seus vizinhos da sub-rede  $B$ . Observando a figura (1.11), podemos defini-los como:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = a(-1, 0). \quad (\text{A.7})$$

Nosso sistema possui invariância translacional, portanto, é interessante definir nosso espaço de Fourier:

$$A(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad B(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} B(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}} \quad (\text{A.8})$$

É importante mencionar que estamos nos limitando aos  $\vec{k}$  pertencentes à primeira ZB. Agora, vamos usar as duas equações em (A.8) em nosso Hamiltoniano:

$$H = -t \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} A^\dagger(\vec{R}) B(\vec{R} + \vec{\delta}) + h.c. = -\frac{t}{N} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{R}+\vec{\delta})} A^\dagger(\vec{k}) B(\vec{k}') + h.c. \quad (\text{A.9})$$

isolando a somatória em  $\vec{R}$ , obtemos:

$$H = -t \sum_{\vec{\delta}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}} A^\dagger(\vec{k}) B(\vec{k}') \left( \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{R}\cdot(\vec{k}'-\vec{k})} \right) + h.c. \quad (\text{A.10})$$

o termo em parenteses é uma delta de kronecker, como os argumentos da exponencial se anulam, a delta nos devolve o valor 1, portanto, o Hamiltoniano que obtemos é:

$$H = -t \sum_{\vec{\delta}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}} A^\dagger(\vec{k}) B(\vec{k}) + h.c. \quad (\text{A.11})$$

Para conseguirmos acessar o espectro de energia do grafeno, precisamos diagonalizar a matriz Hamiltoniana de Bloch. Definiremos que  $\Omega(\vec{k}) = \left( A(\vec{k}), B(\vec{k}) \right)^T$ , isso implica que podemos reescrever nossa Hamiltoniana da seguinte forma:

$$H = \sum_{\vec{k}} \Omega(\vec{k})^\dagger \mathcal{H}(\vec{k}) \Omega(\vec{k}), \quad (\text{A.12})$$

onde  $\mathcal{H}(\vec{k})$  é a matriz Hamiltoniana de Bloch. Seus elementos de matriz são:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

sendo:

$$f(\vec{k}) = -t \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}} \quad (\text{A.14})$$

Vamos reescrever  $f(\vec{k})$  usando todos os vetores  $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2, \vec{\delta}_3$ :

$$\begin{aligned} -t \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}} &= -t (e^{ik_x a/2} e^{ik_y \sqrt{3}a/2} + e^{ik_x a/2} e^{-ik_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik_x a}) \\ &= -t \left( e^{-ik_x a} + 2e^{ik_x a/2} \cos \left( \frac{k_y a \sqrt{3}}{2} \right) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Diagonalizando a matriz  $\mathcal{H}$ , obtemos a energia do espectro do sistema:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\pm} &= \pm t \sqrt{\left( e^{-ik_x a} + 2e^{ik_x a/2} \cos \left( \frac{k_y a \sqrt{3}}{2} \right) \right) \left( e^{ik_x a} + 2e^{-ik_x a/2} \cos \left( \frac{k_y a \sqrt{3}}{2} \right) \right)} \\ \epsilon_{\pm} &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a/2) \cos(3k_x a/2)} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

## APÊNDICE B – CONES DE DIRAC

Como vimos no final da seção 1.3.2 para certos pontos podemos fazer uma expansão local na dispersão de energia para conseguir descobrir o comportamento do elétron para aquele local. Na figura 1.20, vimos que o elétron se comporta como um elétron livre, porém com uma massa efetiva característica da rede monoatômica 1D, aqui vamos discutir o comportamento da dispersão linear do elétron nos cones de Dirac do grafeno.

Queremos tratar dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  onde temos  $\epsilon_{\pm} = 0$ . Na seção (1.2.3), temos a figura (1.15) que dispõe as coordenadas desses pontos. Como a física dos cones de Dirac aparece em ambos, basta apenas que estudemos uma única expansão ao redor do ponto  $\mathbf{K}$ , isto é:

$$f(\mathbf{K}' + k') = f(\mathbf{K} + k'). \quad (\text{B.1})$$

Vamos escolher o ponto  $\mathbf{K}' \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right)$ , ao aplicarmos uma expansão local, temos que:

$$f(\mathbf{K}' + k') \approx -\frac{3ta}{2} e^{-\frac{2\pi i}{3}} (k'_y + ik'_x) \quad (\text{B.2})$$

Em que nossa matriz hamiltoniana de Bloch é aproximadamente:

$$\mathcal{H}(\mathbf{K}' + k') = -\frac{3ta}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-\frac{2\pi i}{3}} (k'_y + ik'_x) \\ e^{\frac{2\pi i}{3}} (k'_y - ik'_x) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Podendo então a re-escrever como :

$$\mathcal{H}(\mathbf{K}' + k') = \hbar v_F (\vec{k}' \cdot \vec{\sigma}). \quad (\text{B.4})$$

onde temos que  $\sigma$  é o vetor das matrizes de Pauli e  $v_F$  é a velocidade de fermi, sendo  $v_f = \frac{3ta}{2\hbar}$ . Diagonalizando  $\mathcal{H}$  obtemos as seguintes energias:

$$E = \pm \hbar v_F \sqrt{(k'_y + ik'_x)(k'_y - ik'_x)} = \pm \hbar v_F |k'| \quad (\text{B.5})$$

Como vimos em [34], a hamiltoniana de Dirac possui a forma :

$$H_{\text{Dirac}} = c \sum_i \alpha_i p_i + \beta m c^2. \quad (\text{B.6})$$

Onde as matrizes  $\alpha$  e  $\beta$  satisfazem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \beta^2 &= 1 \\ \{\alpha_i, \beta\} &= 0 \\ \{\alpha_i, \alpha_j\} &= 2\delta_{ij} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

De modo que percebemos que nosso hamiltoniano de Bloch (B.4) é uma matriz hamiltoniana de Dirac em duas dimensões, basta notarmos que  $\alpha_i = \sigma_i$  e  $m = 0$ . Isso é fascinante, pois os cones de Dirac no grafeno possui elétrons que se comportam como se não tivessem massa!