

Renan da Paixão Maciel

# Transporte em constrições geométricas de isolantes topológicos

Uberlândia

2020

Renan da Paixão Maciel

# Transporte em constrições geométricas de isolantes topológicos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito para obtenção do Título de Mestre em Física.

Área de concentração: Física da matéria condensada

Orientador: Prof. Dr. Gerson J. Ferreira

Uberlândia  
2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

---

- M152t  
2020
- Maciel, Renan da Paixão, 1993-  
Transporte em restrições geométricas de isolantes  
topológicos [recurso eletrônico] / Renan da Paixão Maciel. - 2020.
- Orientador: Gerson Júnior Ferreira.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,  
Programa de Pós-Graduação em Física.  
Modo de acesso: Internet.  
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2020.3616>  
Inclui bibliografia.  
Inclui ilustrações.
1. Física. I. Ferreira Júnior, Gerson, 1982-, (Orient.). II.  
Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em  
Física. III. Título.

---

CDU: 53



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
 Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física  
 Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1A, Sala 213 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902  
 Telefone: (34) 3239-4309 - www.infis.ufu.br - cpqfisica@ufu.br



### ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Física				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado				
Data:	Vinte e um de fevereiro de 2020	Hora de início:	14:00	Hora de encerramento:	15:35
Matrícula do Discente:	11812FIS006				
Nome do Discente:	Renan da Paixão Maciel				
Título do Trabalho:	Transporte em restrições geométricas de isolantes topológicos				
Área de concentração:	Física				
Linha de pesquisa:	Estrutura eletrônica e simulações computacionais				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Dinâmica dependente de spin em isolantes topológicos - (CNPQ)				

Reuniu-se no Anfiteatro do Bloco 1X, Campus Santa Mônica, da Universidade Federal de Uberlândia, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Física, assim composta: Professores Doutores: Augusto Miguel Alcalde Milla - INFIS/UFU; Caio Henrique Lewenkopf - UFF e Gerson Ferreira Junior - INFIS/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos o(a) presidente da mesa, Dr. Gerson Ferreira Junior, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato(a), agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.

Documento assinado eletronicamente por **Caio Henrique Lewenkopf, Usuário Externo**, em 28/02/2020, às 16:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gerson Ferreira Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 05/03/2020, às 15:15, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Augusto Miguel Alcalde Milla, Membro de Comissão**, em 11/03/2020, às 09:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://www.sei.ufu.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1897903** e o código CRC **86F6675A**.



# Agradecimentos

Agradeço...

... primeiro a Deus, pois aprendi por meio da fé a ter esperanças de chegar onde estou hoje.

... ao meu orientador Prof. Dr. Gerson J. Ferreira, que desde o início me desafiou além dos meus limites. Foram 6 anos de companheirismo a contar da graduação. Pelo esforços imensuráveis para me levar em eventos importantes e me manter motivado. Por me fazer crescer profissionalmente, pela paciência com minhas incansáveis falhas e pela repetida frase: "... detalhes, Renan ! Tem que pensar nos detalhes !".

... a minha família [mãe Cláudia, irmãos Rafael, Rodrigo e minha bisavó Severina], que mesmo de longe e com pouco recurso financeiro durante este momento, se esforçaram para que eu atingisse meu objetivo.

... a minha noiva Letícia, que durante todo o mestrado, seguiu firme comigo e cuidou muito bem de mim. Por me apoiar e estar ao meu lado não só nos momentos alegres e descontraídos, mas até mesmo os mais difíceis (como as tensões em épocas de provas, até mesmo as noites viradas para finalizar esta dissertação de mestrado).

... a Francisco Van Riel Neto, que se tornou um grande amigo nestes 2 anos de luta. Principalmente pelos dias que ficou até mais tarde da noite (em véspera de provas) estudando comigo. O fardo se tornou muito mais leve com isso.

... a todos os colegas do laboratório 1 × 06.

... agradeço ao professor Caio Lewenkopf pela discussão e a brilhante ideia de introduzir impurezas no sistema.

*"Objective truths are established by evidence.  
Personal truths by faith."  
(Neil deGrasse Tyson)*



# Resumo

O efeito Hall quântico de spin (QSHE, do inglês *quantum spin Hall effect*) é uma fase quântica da matéria em que o material bidimensional apresenta estados condutores na borda enquanto que permanece isolante em seu interior. Esta fase apresenta condutância perfeita e quantizada mesmo em presença de impurezas não magnéticas ou defeitos geométricos que possam surgir num material semiconductor. Sua estrutura de bandas eletrônica é representada por um cone de Dirac que representa aos estados de bordas do material. Em geral, a fase de QSHE ocorre nos isolante topológicos bidimensionais como consequência da correspondência bulk-fronteira. Em particular, aqui iremos considerar o isolante topológico HgTe-CdTe, descrito pelo Hamiltoniano BHZ. Para entender estes materiais e estudar suas propriedades eletrônicas, primeiro estudamos hamiltoniano tipo Dirac e conceitos de transporte relacionados ao formalismo de Landauer. Depois, implementamos este hamiltoniano numericamente e exploramos suas propriedades eletrônicas simulando um sistema bidimensional com constrição geométrica. Durante esta etapa, consideramos um potencial de impureza no interior desta constrição e investigamos a dinâmica da densidade da corrente de spin.

Para os parâmetros escolhidos para a constrição, induzimos os autoestados das bordas superior e inferior se hibridizarem. Como consequência, observamos abertura de um gap na relação de dispersão e o surgimento de ressonâncias de Fabry-Pérot no interior desta constrição (efeito semelhante aos harmônicos de uma corda de violão). Descobrimos que este fenômeno está relacionado com a criação de um número inteiro de vórtices dentro desta região de constrição. Nossos resultados nos permitem afirmar que este número está diretamente relacionados ao número de picos encontrados no gráfico de condutância. Em outras palavras, quando a energia corresponde ao primeiro pico de ressonância, observamos apenas um vórtice sendo criado. Quando aumentamos a energia para o segundo pico, observamos dois vórtices, e assim por diante. Notamos também, que para um número par de vórtices a densidade de corrente é aproximadamente nula na região central. Consequentemente, surge um nó nesta região. A fim de explorar esta característica e de investigar o fenômeno de Fabry-Pérot, estudamos a dinâmica da corrente de spin na presença de alguma impureza escalar ou magnética. (Aqui, consideramos a impureza como um potencial externo ou um contacto magnético colocado na região de constrição). Descobrimos que colocando a impureza no nó, apenas os números ímpares desses vórtices são afetados.

**Palavras-Chave:** Transporte eletrônico, Spintrônica, Isolantes topológicos, Filtros de spin, sistemas mesoscópicos

# Abstract

The QSHE is a quantum phase of matter defined by a pair of opposite spin currents in each edge of two-dimensional material known as helical edge states. More specifically, these pairs are Kramer states created by the time-reversal invariance and are very robust against non-magnetic impurities and lattice defects that may appear, which leads to a system to avoid backscattering phenomena. Its electronic band structure is represented by a closed Dirac-cone, which defines a metallic phase for each conducting channel at the boundaries. It is known the QSHE occurs in bidimensional topological insulators due to the bulk-edge correspondence. In particular, here we consider the topological insulator HgTe-CdTe which is described by the topological band theory through the BHZ Hamiltonian. To understand and study these materials and its electronic properties, we study Dirac-like Hamiltonians and transport concepts related to Landauer's formalism. Additionally, we implement the BHZ Hamiltonian numerically and explore the electronic properties of a two-dimensional topological insulator with geometric constrictions. At that point, we consider an impurity potential inside that constriction region and investigate the dynamics of the spin current density.

For the chosen parameters, the geometrical constriction drives to the opposite eigenstate of spins edge channels to hybridize among each other. Consequently, the Dirac energy spectrum opens a gap in the constriction region, and Fabry-Pérot resonances emerge. We observed this phenomenon is related to the creation of an integer number of the vortex within this constriction region, and our results allow us to state that these numbers are directly related to the number of resonance peaks found in the conductance. In other words, when the energy eigenvalues correspond to the first peak, we observe only one vortex being created. When we increase the energy for the second peak, we observe two vortices, and so on. We have noticed that for an even number of vortices, the spin current density creates a node in the central region inside this constriction. In order to investigate the dynamics of the spin current and its relations to the Fabry-Pérot phenomenon, we consider a scalar and magnetic impurity (an external lead or a magnetic contact) inside this node. We have found that placing the impurity in this node, only the odd numbers of these vortices are affected.

**Keywords:** Quantum transport, Spintronics, Topological insulators, Spin filters, Mesoscopic systems

# Sumário

	<b>Sumário</b> . . . . .	<b>8</b>
<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>10</b>
1.1	<b>O efeito Hall</b> . . . . .	<b>11</b>
1.1.1	Caso Clássico . . . . .	11
1.1.2	Caso quântico . . . . .	13
1.1.3	Acoplamento spin-órbita . . . . .	19
1.1.4	Caso "clássico"envolvendo spin . . . . .	20
1.1.5	Caso quântico envolvendo spin . . . . .	21
1.2	<b>Topologia e efeito Hall quântico</b> . . . . .	<b>21</b>
1.2.1	Topologia . . . . .	22
1.2.2	Isolantes topológicos . . . . .	23
1.3	<b>Organização da dissertação</b> . . . . .	<b>24</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTOS TEÓRICOS E METODOLOGIA</b> . . . . .	<b>26</b>
2.1	<b>A equação de Dirac</b> . . . . .	<b>26</b>
2.1.1	Soluções da equação de Dirac . . . . .	28
2.2	<b>Solução numérica para Hamiltonianos lineares em <math>k</math></b> . . . . .	<b>33</b>
2.2.1	Método das diferenças finitas e o problema da duplicação de férmions . . . . .	33
2.2.2	Contornando o problema da duplicação de férmions . . . . .	35
2.3	<b>Breve teoria sobre transporte eletrônico</b> . . . . .	<b>37</b>
2.3.1	O regime balístico . . . . .	37
2.4	<b>A matriz de espalhamento-S e de transferência-M</b> . . . . .	<b>38</b>
2.4.1	Sistema trivial parabólico . . . . .	38
2.4.2	Operador densidade corrente . . . . .	41
2.4.3	Lei da conservação de carga, simetria de reversão temporal . . . . .	42
2.4.4	Cálculo da corrente, fórmula de Landauer . . . . .	43
2.5	<b>Simulações e exemplos com Hamiltonianos tipo Dirac</b> . . . . .	<b>46</b>
2.5.1	Cálculo do coeficiente de transmissão para um sistema unidimensional . . . . .	46
2.6	<b>Simulações via Kwant</b> . . . . .	<b>49</b>
2.6.1	Hamiltoniano BHZ discretizado . . . . .	49
<b>3</b>	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	<b>52</b>
3.1	<b>O modelo</b> . . . . .	<b>52</b>
3.2	<b>Análise do sistema sem impureza</b> . . . . .	<b>55</b>
3.3	<b>Casos com impurezas</b> . . . . .	<b>59</b>

---

3.3.1	Potencial de impureza escalar $\sigma_0$ . . . . .	59
3.3.2	Potencial de impureza $\sigma_x$ ou $\sigma_y$ . . . . .	60
3.3.3	Potencial de impureza $\sigma_z$ . . . . .	64
3.4	Perspectivas futuras . . . . .	68
4	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	69
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	70
	<b>APÊNDICE A – EFEITO HALL CLÁSSICO</b> . . . . .	74
	<b>APÊNDICE B – EFEITO HALL QUÂNTICO</b> . . . . .	75
	<b>APÊNDICE C – CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ONDA</b> . . . . .	77
	<b>APÊNDICE D – O CÓDIGO UTILIZADO</b> . . . . .	79
D.1	Código kwan 1. Método simples e sem impureza . . . . .	79
D.2	Código kwan 2. Otimizado e com impureza . . . . .	82
D.3	Código kwan para o cálculo das propriedades físicas . . . . .	84

# 1 Introdução

O estudo do funcionamento dos dispositivos eletrônicos é uma linha de pesquisa fundamental e sempre ativa pois, é inegável a importância destes dispositivos no cotidiano da sociedade. Por exemplo, após a invenção do transistor (semicondutor geralmente feito de silício ou germânio) em 1947, telefones, carros, aviões e até mesmo computadores, evoluíram constantemente até os dias de hoje. Seu funcionamento consiste basicamente em controlar o fluxo de carga em circuitos eletrônicos, atuando como uma chave binária. Isto é, permitindo ou não a passagem de corrente dentro deste circuito. Com isso, foi possível construir diversos circuitos integrados capazes de processar informações de maneira cada vez mais rápida e efetiva.

Embora o surgimento de semicondutores tenha gerado um grande impacto tecnológico, a busca por dispositivos cada vez mais eficientes e com baixo consumo energético desencadeou num campo de pesquisa chamado de spintrônica[1, 2]. Aqui, os processos de geração e controle de corrente estão associados a dinâmica do spin da carga eletrônica. A spintrônica teve sua origem em experimentos que investigavam as propriedades de tunelamento dependente de spin em materiais ferromagnéticos. Neste contexto, o experimento que mais se destacou foi um sistema criado por Albert Fert, Peter Grünberg. Este sistema consistia de duas camadas magnéticas (sendo uma com magnetização fixa enquanto a outra com magnetização maleável) separadas por uma não-magnética[2]. O funcionamento deste sistema baseia-se em permitir ou bloquear a corrente de spin através do dispositivo, controlando-se a polarização da camada magnética maleável. Isto é, quando a camada maleável possui a mesma polarização da camada fixa, a passagem do spin é permitida e ocorre a condução. Em contrapartida, quando as polarizações da camada fixa e da maleável são opostas entre si, a resistividade torna-se muito alta e a condução do fluxo da corrente de spin é bloqueada. O aumento nesta resistividade é conhecido hoje como fenômeno da magnetoresistência gigante (GMR, do inglês *giant magnetoresistance*). Com essa descoberta, aumentou-se a capacidade de armazenamento dos discos rígidos (HD) dos computadores, saindo de gigabytes para terabytes. Os responsáveis pela origem deste fenômeno, receberam o prêmio Nobel em 2007[3].

Além dos experimentos de tunelamento, outras pesquisas que auxiliam na compreensão das propriedades de transporte de spin são aquelas que envolvem o fenômeno de efeito Hall. Mais especificamente, o efeito Hall quântico de spin[4, 5] (abordaremos mais detalhes sobre este fenômeno no final deste capítulo). Sistemas que apresentam este fenômeno possuem canais de condução de corrente de spin nas bordas do material, enquanto que em seu interior permanecem isolantes. Semicondutores que exibem essas características são chamados de isolantes topológicos[6] e atualmente estes tem sido alvo de inúmeros estudos com promessas de aplicações tecnológicas[7, 8, 9]. O emergente interesse nestes

tipos de dispositivos surgiu pois, em isolantes topológicos, a condução eletrônica mostra-se intacta mesmo na presença sob influência de impurezas ou imperfeições geométricas do sistema. Desde sua descoberta, foram realizadas diversas previsões teóricas utilizando poços quânticos de telureto de mercúrio[4, 10] (HgTe), ligas de antimônio de bismuto, e cristais de seleneto de bismuto ( $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ) e telureto de bismuto ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) que mais tarde vieram a ser observadas experimentalmente[11]. Em suma, todo o estudo desenvolvido deposita sua esperança em que, dispositivos semicondutores baseados na dinâmica de spin, superem os semicondutores usuais[12].

## Objetivos e desafios da pesquisa

Neste trabalho, propomos teoricamente a construção de um filtro de spin baseado em isolantes topológicos com constrição geométrica. Este filtro seleciona a polarização do spin durante o processo de condução e permite somente um único tipo polarização atravessar o dispositivo. Para esta proposta, nós estudamos o transporte eletrônico em poços quânticos formado pela heteroestrutura de telureto de mercúrio e telureto de cádmio. Para compreender os fenômenos físicos que envolvem este sistema, primeiro revisamos os conceitos sobre poços quânticos formados por este tipo material disponíveis na literatura. Segundo, verificamos as condições necessárias para implementar numericamente Hamiltonianos tipo Dirac. Após estas etapas, discutimos os conceitos de transporte segundo a teoria de Landauer para em seguida implementar nossa proposta. Em nossas simulações, exploramos diversas propriedades de transporte envolvendo spin na ausência e na presença de potenciais de impurezas. As principais análises que realizamos nesta dissertação envolvem investigar: I) relação de dispersão, II) condutância entre dois contatos terminais a III) a polarização da densidade de corrente de spin quando o sistema está sob influência de potenciais de impurezas (ou contato magnéticos).

Para a compreender os fenômenos discutidos neste trabalho, começo esta seção abordando sobre a origem do efeito Hall clássico e quântico; em seguida discuto sobre os efeitos do acoplamento spin-órbita em cristais, depois sobre a descoberta do efeito Hall de spin e sobre o efeito Hall quântico de spin; e na sequência, abordo brevemente sobre a teoria por trás dos isolantes topológicos.

## 1.1 O efeito Hall

### 1.1.1 Caso Clássico

Em 1878, Edwin Hall, estudante da universidade americana *Johns Hopkins University* observou o fenômeno que mais tarde levou seu nome: o efeito Hall. A motivação que conduziu Hall a este fenômeno foi a conclusão errônea de James Clerk Maxwell publicada na primeira versão do seu livro publicado em 1873, chamado de *Treatise on Electricity*

and Magnetism [13, 14]. Maxwell dizia que a força que gera o movimento eletrônico atuava no condutor e não sobre as cargas. Para refutar essa afirmação, Hall realizou experimentos com materiais sólidos submetidos a campos elétricos  $\mathbf{E}$  e magnéticos  $\mathbf{B}$  como esquematizado na Fig. 1(a). Ao contrário daquela época, hoje sabe-se que estes campos defletem o movimento eletrônico dos portadores de carga por meio da força de Lorentz,

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (1.1)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade da partícula de carga  $q$  e de massa  $m$ . Esta força gera acúmulo de cargas nas bordas laterais do material que conseqüentemente cria uma diferença de potencial transversal  $V_H$ , conhecida como voltagem Hall. Devido a esta voltagem, surge a condutância transversal, comumente referenciada como condutância Hall. Em seus estudos, Hall concluiu que o fenômeno estudado por ele dependia somente das propriedades intrínsecas do material condutor.

A trajetória realizada pelo elétron sob ação de  $\mathbf{F}$ , neste tipo de sistema, é circular e clássica. Portanto, seu movimento é descrito pela solução da  $F = d\mathbf{p}/dt$ , que para o campo elétrico nulo, i.e.  $\mathbf{E} = 0$ , é

$$x(t) = x_0 - R \sin(\omega t + \phi) \quad \text{e} \quad y(t) = y_0 + R \sin(\omega t + \phi), \quad (1.2)$$

onde  $X_0$  e  $Y_0$  representam as coordenadas do movimento em  $t = 0$ . Os valores de  $R$ ,  $\omega = eB/m$  e  $\phi$  representam respectivamente o raio da trajetória circular, a frequência ciclotron (frequência do movimento circular) e uma fase arbitrária. Seguindo a linha do tempo, em 1900, Paul Drude também propôs um modelo para explicar a condução elétrica em materiais sólidos. Ligeiramente distinto do modelo descrito por Hall, Drude considerou que movimento eletrônico sofria colisões aleatórias durante seu percurso de trajetória, ocasionadas por meio das impurezas presentes no material. Tal efeito é representado adicionando-se a força de fricção  $\mathbf{F}_f = -(m/\tau)\mathbf{v}$  na Eq.(1.1), ou seja,

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \mathbf{F}_f, \quad (1.3)$$

$$= q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{m}{\tau}\mathbf{v}, \quad (1.4)$$

onde  $\tau$  é o tempo de espalhamento entre colisões. A densidade de corrente que atravessa o material é  $\mathbf{J} = q\eta_{2D}\mathbf{v}$ , onde  $\eta_{2D}$  é a densidade eletrônica. Solucionando a Eq.(1.4) para situação de equilíbrio (i.e.  $d\mathbf{p}/dt = 0$ ) e substituindo na expressão de  $\mathbf{J}$ , encontramos a lei de Ohm escrita na forma

$$\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E} \quad \text{sendo,} \quad \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \frac{\sigma}{1 + \omega^2\tau^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega\tau \\ -\omega\tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

onde  $\sigma = (\eta_{2D}q^2\tau)/m$  é a condutividade (para mais detalhes, ver Apêndice A). Esta grandeza indica a facilidade com que um material conduz corrente elétrica ao longo do

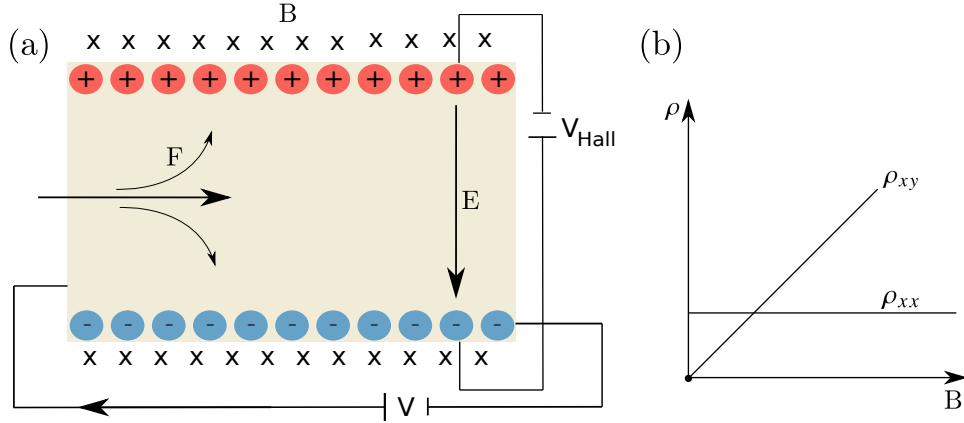


Figura 1 – (a) Esquematização do sistema Hall (b) gráfico da resistividade em relação a intensidade do campo magnético aplicado.

material. A Eq.(1.5) nos informa que  $\sigma$  é uma matriz (ou tensor) em que os termos fora da diagonal ( $\sigma_{xy|yx}$ ) são responsáveis pelo fenômeno do efeito Hall. Note que como  $\omega = qB/m$ , quando a componente do campo magnético é  $B = 0$ ,  $\sigma_{xy|yx} = 0$ . Como o inverso da condutividade é a resistividade, i.e.  $\rho = \sigma^{-1}$ , a Eq. (1.5) pode ser reescrita como  $\mathbf{E} = \rho\mathbf{J}$ , onde

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^{-1} & B/\eta_{2D}e \\ -B/\eta_{2D}e & \sigma^{-1} \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Se, por exemplo, nenhuma corrente é aplicada na direção  $y$ , i.e.  $J_y = 0$ , a Eq. (1.6) para o campo elétrico torna-se:  $E_y = \rho_{yx}J_x$  e portanto, isto significa que o campo elétrico  $E_y$  surgiu devido aplicação de uma corrente ao longo da direção  $x$ . Na literatura, comumente encontramos gráficos experimentais relacionados as grandezas  $\rho_{xx}$  e  $\rho_{xy}$  como indicado pela Fig.1(b). Além da resistividade, outra maneira de se obter informações sobre este experimento é através do coeficiente Hall  $R_H$ . Por meio desta mesma consideração, onde  $J_y = 0$ , podemos definir a expressão algébrica que representa  $R_H$  manipulando  $\rho_{yx}$  da seguinte maneira,

$$\rho_{xy} = \frac{B}{q\eta_{2D}} \longrightarrow \frac{\rho_{xy}}{B} = R_H = \frac{1}{q\eta_{2D}}. \quad (1.7)$$

Note que o coeficiente Hall não depende do campo magnético nem do termo de espalhamento  $\tau$  considerado na equação de Drude. No entanto, contém informações microscópicas do sistema, como a densidade eletrônica  $\eta_{2D}$  e o valor  $q = \pm e$ , sendo negativo para elétrons e positivo para buracos, que independem da presença de impureza no sistema.

### 1.1.2 Caso quântico

Diferentemente do efeito Hall clássico, o efeito Hall quântico[16] (QHE, do inglês *quantum Hall effect*) considera um gás de elétrons livre num plano bidimensional a baixíssimas temperaturas (i.e.  $k_B T \ll \hbar\omega$ ) sob influência de um intenso campo magnético  $\mathbf{B}$ . Neste



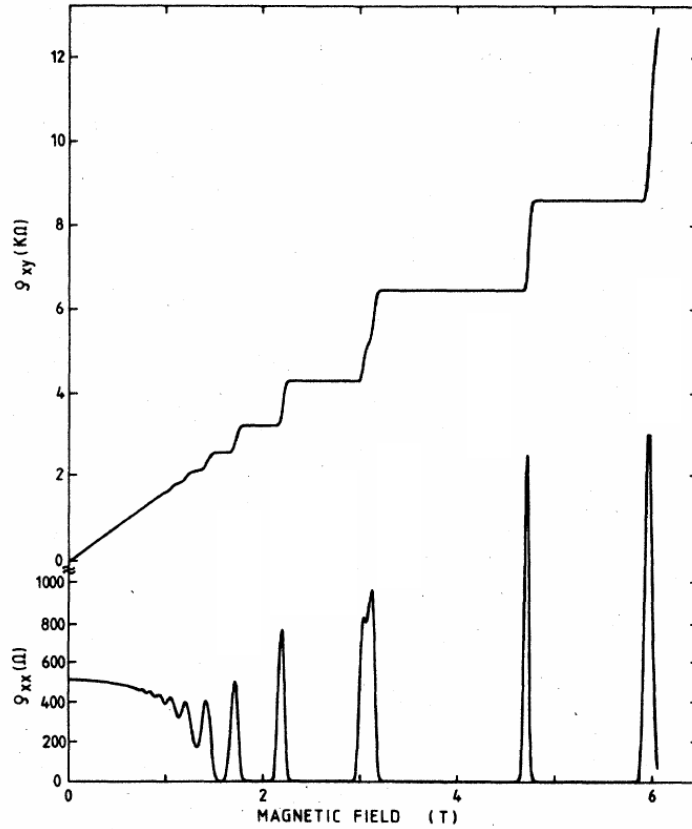


Figura 2 – Representação dos platôs encontrados experimentalmente para a resistência Hall  $\rho_{xy}$  em relação ao campo magnético. O gráfico com os picos bem definidos representam a resistividade  $\rho_{xx}$ . Fonte: von Klitzing (1986)[15] - ADAPTADO

tipo de sistema, a medida com que o campo aumenta os elétrons do estado fundamental começam a orbitar entorno das linhas de campo geradas por  $\mathbf{B}$ . Cada órbita é representada por valores discretos de energia  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$  onde  $\omega \propto \mathbf{B}$ , e são comumente chamadas de níveis de Landau. Esses níveis dão origem a sucessivos platôs observados na resistência Hall, como mostra o gráfico da Fig. 2. O primeiro a observar estes platôs foi Klaus von Klitzing[17, 18, 19]. Ele percebeu que a condutância Hall e seus sucessivos platôs eram múltiplos de  $e^2/h = 1/(25812.807572)\Omega$  e por esta descoberta, recebeu o prêmio Nobel em física em 1985. Este fenômeno foi nomeado como efeito Hall quântico inteiro (IQHE, do inglês *integer quantum Hall effect*). Os mais comuns experimentos de efeito Hall quântico foram (e ainda são) observadas até hoje em poços quânticos de Arseneto de Gálio ( $GaAs$ ), embora em 2007 tais platôs também foram observados em grafeno[20] e em óxido de magnésio e zinco[21] ( $ZnO-Mg_xZn_{1-x}O$ ).

O Hamiltoniano que representa o efeito Hall quântico é descrito como

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 \quad (1.8)$$

em que  $\mathbf{p}$  é o operador momento e  $q = -e$  é a carga eletrônica que está submetida ao campo magnético representado pelo potencial vetor  $\mathbf{A}$  pela relação  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Em

termos dos operadores de abaixamento ( $a$ ) e levantamento ( $a^\dagger$ ), este mesmo Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H = \hbar\omega \left( aa^\dagger + \frac{1}{2} \right), \quad (1.9)$$

onde  $\omega = eB/m$  é a frequência ciclotron (para mais detalhes sobre a derivação deste Hamiltoniano, consulte o Apêndice B). Note que a Eq. (1.9) representa um Hamiltoniano de um oscilador harmônico e que seu espectro de energia é dado por

$$E_\nu = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (1.10)$$

onde  $E_\nu$  é a autoenergia discretizada que representa os níveis de energia de Landau  $\nu$ . Cada nível de energia de Landau só é preenchido por valores inteiros de  $\nu$  e a separação entre esses níveis é de  $\Delta E = \hbar\omega = \hbar(eB/m)$ . Isso significa que, a medida que o campo  $B$  aumenta, esta diferença cresce e cada nível torna-se fortemente degenerado. No entanto, se o campo  $B$  diminui, ao passo que  $\mathbf{B} \rightarrow 0$ , então  $\Delta E \rightarrow 0$ . Quando isto ocorre, passam a existir oscilações quânticas no sistema conhecidas como Shubnikov–de Haas[22, 23].

Para estudar a função de onda no regime do QHE, devemos primeiramente, escolher a geometria do sistema de interesse. Feito isto, somos capazes de estabelecer um calibre adequado para o potencial vetor  $A$  que melhor soluciona a equação de Schrodinger  $H\psi = E\psi$ . Por simplicidade, vamos considerar uma geometria retangular em que a função de onda  $\psi$  é invariante na direção  $\hat{\mathbf{y}}$ . O calibre mais adequado para esta situação é o calibre de Landau, onde  $\mathbf{A} = xB\hat{\mathbf{y}}$  pois assim,  $\nu, k_y$  tornam-se bons números quânticos que diagonalizam o Hamiltoniano da Eq. (1.9). Em outras palavras, a invariância translacional na direção  $\hat{\mathbf{y}}$  nos garante que  $p_y$  se conserve, pois  $[H, p_y] = 0$ , enquanto que em  $p_x$  não, já que  $[H, p_x] \neq 0$ . Devido a isso, podemos afirmar que a função de onda que melhor representa este sistema será do tipo  $\psi_{\nu, k_y}(x, y) = e^{ik_y y} \phi_{k_y}(x)$ . Sendo assim, se reescrevermos o Hamiltoniano da Eq. (1.8) como

$$H = \frac{1}{2m} \left[ p_x^2 + \left( p_y^2 + eBx \right)^2 \right], \quad (1.11)$$

e solucionarmos a equação  $H\psi_{\nu, k_y} = E_\nu \psi_{\nu, k_y}$ , encontramos

$$H_x = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left( x + l_B^2 k_y \right)^2. \quad (1.12)$$

Este Hamiltoniano corresponde somente ao movimento eletrônico sobre o eixo- $x$ . Note que  $H_x$  descreve um oscilador harmônico unidimensional cuja função de onda tem seu centro da órbita localizado em  $x = -l_B^2 k_y$ , onde  $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$  é o comprimento de escala dependente do campo  $B$ . A partir da solução da equação  $H_x \phi_k(x) = E_x \phi_k(x)$ , encontramos que  $\psi_{\nu, k}(x, y)$  será

$$\psi_{\nu, k_y} \propto \exp \left( ik_y y \right) \mathcal{H}_\nu \left( x + l_B^2 k_y \right) \exp \left( -\frac{\left( x + l_B^2 k_y \right)^2}{2l_B^2} \right), \quad (1.13)$$

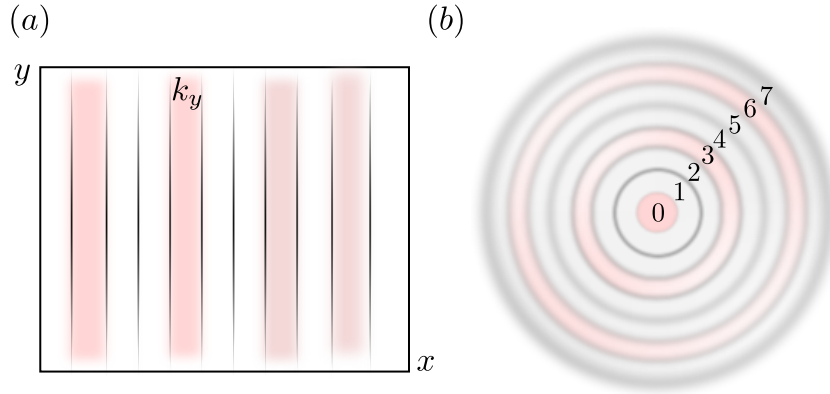


Figura 3 – (a) Representação dos estados da função de onda para o calibre de Landau. As faixas são rotuladas pelo vetor de onda  $k_y$  (b) Representação dos estados da função de onda para o calibre simétrico. Nesta figura, as regiões rotuladas pelos valores 0,3,6 representam estados ocupados. Z.F. Ezawa (2001)[24] - ADAPTADO

onde  $\mathcal{H}_\nu$  representa os polinômios de Hermite e o símbolo de proporcionalidade indica que é necessário normalizar  $\psi_{\nu,k}$ . Para o calibre e a geometria do sistema considerados aqui, as órbitas de Landau tem momento  $\hbar k_y$  e sua degenerescência é representada por tiras retangulares que são usualmente classificadas por meio de seu vetor de onda  $k_y$ , como ilustrado na Fig.3(a). A degenerescência de cada nível é  $N = BA/\Phi_0 = \Phi/\Phi_0$ , onde  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e$  é uma constante chamada de fluxo quântico, seu valor é aproximadamente  $\approx 2,06783 \times 10^{15} [Wb]$ ,  $\Phi = BA$  é o fluxo total que atravessa a amostra de área  $A$ . Se, neste exemplo, tivéssemos considerado o calibre simétrico, ou seja,  $A_x = By/2$  e  $A_y = -Bx/2$ , tais padrões seriam circulares como ilustrado na Fig.3(b). Para mais detalhes sobre o calibre de simétrico consulte a referência[24].

### 1.1.2.1 Condutividade nos níveis de Landau

A Fig. 2 é um resultado experimental e nos informa quando a resistividade  $\rho_{xy}$  apresenta um platô e quando esta mesma resistividade salta desse mesmo platô para o próximo. A expressão algébrica deste resultado é dada pela relação

$$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu}. \quad (1.14)$$

Ao comparar esta expressão com a Eq. (1.7) obtida anteriormente, encontramos

$$\frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu} = \frac{B}{q\eta_{2D}} \rightarrow \eta_{2D} = \frac{B}{\Phi_0} \nu \quad (1.15)$$

A Eq. (1.15) informa a densidade eletrônica  $\eta_{2D}$  necessária para o preenchimento de um nível de Landau  $\nu$ . Estes níveis permanecem vazios se a energia de excitação  $k_B T$  for muito menor que a energia de separação entre os níveis de energia  $\hbar\omega$  (ou seja,  $k_B T \ll \hbar\omega$ ). Uma vez que um nível  $\nu$  é preenchido, surge um gap de energia  $\Delta E$  entre este e o próximo

nível. Portanto, para calcular a condutividade de uma única partícula livre neste sistema, é necessário somar sobre todos estes possíveis estados preenchidos.

Dessa maneira, o valor esperado para cálculo quântico da corrente fica

$$\mathbf{I} = -\frac{e}{m} \sum^* \langle \psi_{\nu, k_y} | \mathbf{p} + e\mathbf{A} | \psi_{\nu, k_y} \rangle \quad \text{sendo,} \quad (1.16)$$

$$\mathbf{I} = \begin{cases} I_x = 0 \\ I_y = -ev \sum_{k_y} \frac{E}{B} \end{cases} \quad \text{onde, } \sum_{k_y} \rightarrow N = \frac{BA}{\Phi_0}, \quad (1.17)$$

onde o símbolo (\*) no somatório indica que a soma deve ser realizada sobre todos os estados preenchidos nos níveis de Landau.

Como cada nível de Landau está associado a um estado quântico, o somatório da Eq. (1.17) deve ser decomposta em  $\sum^* \rightarrow \sum_{\nu} \sum_{k_y}$ . Perceba que as correntes  $I_x$  e  $I_y$  são as componentes da corrente em duas direções diferentes. Além disso, note que substituindo a expressão da Eq. (1.17) na definição de densidade de corrente, i.e.  $J = I/A$ , onde  $A = L_x L_y$  é a área do sistema, encontramos exatamente a expressão da Eq. (1.5).

### Como surgem os estados de borda

Uma visão simples e clássica dos estados de borda está representada na Fig. 4. Esta imagem ilustra a situação em que partículas em movimento ciclotrônico estão próximas a fronteira de um material finito de largura  $L_x$ . Quando estas partículas carregadas colidem nestas fronteiras, surgem fluxos de carga cujo movimento é unidimensional e oposto em cada uma das bordas. Na abordagem quântica, esta borda é interpretada como um potencial  $V$  e sua forma não precisa ser plana nem simétrica ao longo da região central do sistema (bulk) como ilustra a Fig.4. Uma vez que  $V$  é suave nas bordas, se comparado

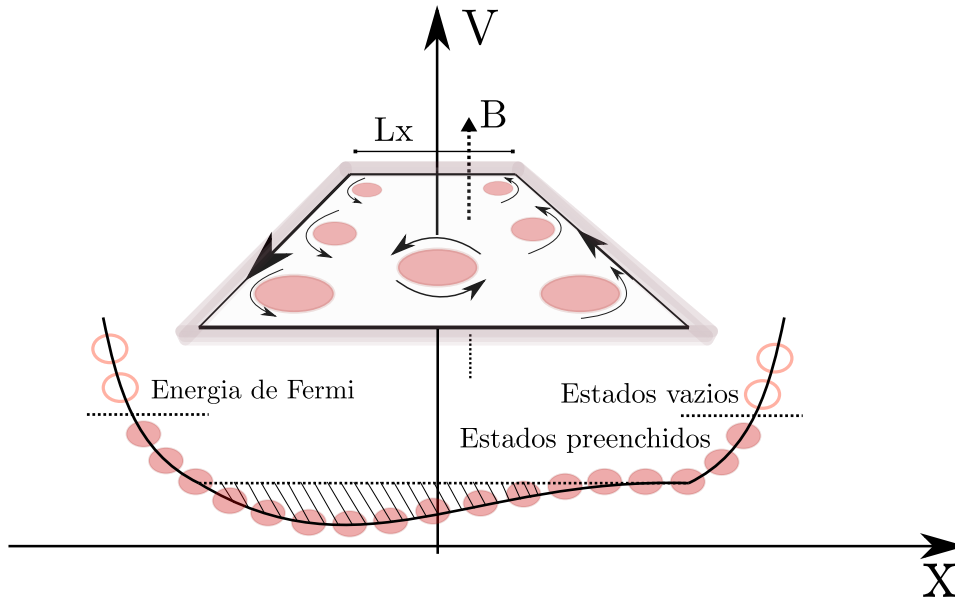


Figura 4 – Representação dos estados de borda no IQHE.

com o comprimento de escala  $l_B$ , podemos expandi-lo em série de Taylor pra certo valor de  $x$  próximo a borda e reescrevemos a Eq. (1.12) como

$$H_x = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left(x + l_B^2 k_y\right)^2 + x \frac{\partial V}{\partial x} \quad (1.18)$$

onde  $\partial V/\partial x$  é calculado no centro da órbita  $x_0 = -l_B^2 k_y$ . Como o primeiro termo da expansão é uma constante, é válida a aproximação  $V(x) \approx 0$ . O outro termo, o último da Eq. (1.18), é o campo elétrico<sup>1</sup> atuando na direção  $x$  uma vez que  $\partial V/\partial x = -eE$ . Manipulando algebricamente (ver Apêndice B) a Eq. (1.18) o Hamiltoniano fica na forma

$$H_x = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left[\left(l_B^2 k_y + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{1}{m\omega^2}\right) + x\right]^2 - \frac{1}{2m\omega^2}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 - l_B^2 k_y \frac{\partial V}{\partial x}. \quad (1.19)$$

Agora,  $H_x$  é um oscilador harmônico no qual o potencial está centrado em  $X = -l_B^2 k_y - eE/m\omega^2$ . Nesta situação, as autoenergias do sistema tornam-se

$$E_{n,k} = \underbrace{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}_{\text{quantizacao}} + \underbrace{\frac{m}{2} \frac{E^2}{B^2}}_{\text{energia cinético}} + \underbrace{-eE\left(l_B^2 k_y + \frac{eE}{m\omega^2}\right)}_{\text{energia potencial}} \quad (1.20)$$

e o valor da velocidade eletrônica (nas bordas do material) fica

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_x} = 0, \quad \text{e} \quad v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_y} = \frac{E}{B}. \quad (1.21)$$

O resultado encontrado para as velocidades  $v_x$  e  $v_y$  nos informam duas características importantes neste sistema: I) que o movimento eletrônico é perpendicular ao campo elétrico que está na direção  $x$ , II) que há condutividade Hall, i.e.  $\sigma_{xy} = -\sigma_y x = n(e^2/2\pi\hbar) \neq 0$ . Portanto, isso confirma que há corrente propagando nas bordas do material ao longo da direção  $y$ . Vale lembrar que em bordas opostas, as velocidades são contrárias (Fig. 4) e que os termos da Eq. (1.20) representam, respectivamente, o movimento ciclotrônico, a energia cinética do elétron de velocidade  $v_y = E/B$  e a energia potencial. Exceto pelo primeiro, que informa a quantização do sistema, os demais são um análogo a um oscilador harmônico clássico.

Até este presente momento, abordamos sobre os conceitos teóricos que envolvem os fenômenos de efeito Hall clássico e quântico. Ao longo de toda a discussão, não abordamos nenhum efeito proveniente do spin eletrônico. Além disso, sempre consideramos um sistema bidimensional no plano  $xy$  cuja aplicação de um campo magnético externo se dá na direção perpendicular a esse plano (i.e. direção  $z$ ). Para estendermos nossas discussões sobre o efeito Hall para fenômenos que envolvem o spin do elétron, devemos considerar não mais um campo externo, mas um campo efetivo gerado pelo acoplamento spin-órbita presente no material. Devido a isso, antes de prosseguirmos para os casos que envolvem spin, irei dedicar uma seção para explicar sobre o que é este acoplamento.

<sup>1</sup> O termo campo elétrico utilizado aqui, não é no sentido de uma diferença de potencial aplicada. É um campo elétrico que vem do potencial confinante.

### 1.1.3 Acoplamento spin-órbita

O acoplamento spin-órbita representa a interação entre o momento do elétron com um campo magnético  $\mathbf{B}$  efetivo[25]. Para entendermos como este campo surge, vamos considerar um modelo clássico e simples, formado por apenas um único átomo de hidrogênio. Tipicamente, dizemos que existe um único elétron orbitando em torno do núcleo deste átomo. Isso porque consideramos que o sistema de referência está sobre o núcleo deste átomo e o elétron se move em relação a este referencial. No entanto, quando alteramos este referencial para o elétron, o núcleo (de carga positiva) é que executa o movimento orbital. Em termos de energia, dizemos que o Hamiltoniano que descreve esta configuração é[26, 27]

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (1.22)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética do elétron e o segundo termo o potencial de Coulomb do núcleo atômico sentido por este elétron. O movimento do núcleo cria um campo magnético efetivo  $\mathbf{B}$  que está relacionado ao momento angular orbital  $\mathbf{L}$ , dado pela expressão

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi m r^3} \mathbf{L}, \quad (1.23)$$

em que  $\mu_0$  é a constante da permeabilidade magnética,  $m$  é a massa do elétron,  $Z$  o número atômico, e  $r$  é o raio da órbita circular do núcleo. Quando consideramos a propriedade de spin desse elétron, surge o momento angular de spin  $\mathbf{S}$ . Este mesmo momento  $\mathbf{S}$  acopla com o momento orbital  $\mathbf{L}$  de maneira que o Hamiltoniano da Eq.(1.23) torna-se

$$H_{SOC} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.24)$$

onde  $c$  é a constante da velocidade da luz.  $H_{SOC}$  é o Hamiltoniano que representa o acoplamento spin-órbita (SOC, do inglês *spin-orbit coupling*) deste sistema e deriva-se de um fenômeno relativístico. A consequência deste resultado reflete na mudança nos níveis de energia do elétron, também conhecido como estrutura fina[26, 28].

Até aqui, por questão de simplicidade, inciamos a discussão sobre o efeito SOC a partir de uma visão atômica[29]. No entanto, a grande maioria dos semicondutores são baseados em estruturas periódicas chamadas de cristais<sup>2</sup>. Neste tipo de sistema, o SOC surge quando não há simetria de inversão. Quando essa quebra de simetria acontece na interface do cristal, dizemos que está associado ao SOC de Rashba[30] e que é uma assimetria de inversão estrutural (SIA, do inglês *structural inversion asymmetry*). Quando não há centro de inversão na rede cristalina, dizemos que há uma assimetria de inversão

<sup>2</sup> Estruturas cristalinas são definidas por arranjos periódicos de átomos que definem uma rede que possuem alguma tipo de simetria espacial. Esses arranjos podem ser do tipo Zinblend, Diamante, Wurtzita, entre outros. Alguns exemplos comuns de simetrias espaciais são: simetrias translacionais, rotacionais, e de inversão.

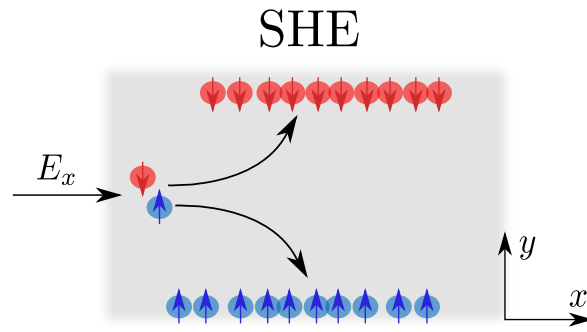


Figura 5 – Acúmulo de spins nas bordas de um material

de bulk (BIA, do inglês *bulk inversion asymmetry*), que está relacionado ao SOC de Dresselhaus[31].

A partir desta breve discussão sobre os efeitos SOC envolvidos em problemas da física da matéria condensada, podemos continuar nossa discussão sobre o fenômeno de efeito Hall envolvendo spins.

#### 1.1.4 Caso "clássico" envolvendo spin

O efeito Hall de spin (SHE, do inglês *spin Hall effect*) foi teoricamente previsto por Dyakonov e Perel em 1971[32]. O SHE é um fenômeno em que um material bidimensional apresenta acúmulos de spin em cada uma das bordas. Diferentemente dos efeitos Hall discutido anteriormente, em que era necessário aplicar um campo magnético externo sobre o sistema, o SHE é observado mesmo quando não há nenhum campo sendo aplicado. Isso porque o acoplamento spin-órbita (SOC) cria um campo magnético efetivo que atua sobre o spin dos elétrons deste material. Sendo mais específico, o SHE só ocorre devido ao SOC induzido localmente pelas impurezas que existem no material[33]. Dependendo da maneira com que cada spin sente este campo gerado pelo SOC, ocorre um tipo de polarização na borda do material (i.e. numa borda todos são spin-up e na outra todos são spin-down). Apesar deste acúmulo não ser causado pela força de Lorentz, costuma-se dizer que o SHE é um análogo clássico do efeito Hall envolvendo spin. Em outras palavras, o termo "clássico" refere-se aonde ambos apresentam acúmulos em suas bordas e que diferentemente do caso quântico, o SHE não forma canais de condução longitudinais ao longo de suas bordas. Esta descoberta, junto ao fato de que a polarização ocorre mesmo na ausência de campos magnéticos, fez com que sistemas com o fenômeno de SHE se sobressaíssem em relação aos demais efeitos Hall. Aliás, a presença de um campo magnético externo nestes tipos de sistemas quebram a simetria de reversão temporal e induzem a precessão de spin (na direção do campo externo aplicado) o que elimina a polarização nas bordas do material. O fenômeno de SHE foi observado aproximadamente 30 anos após a previsão de Dyakonov e Perel e tem sido observado até hoje em materiais como GaAs e filmes finos de InGaAs.

### 1.1.5 Caso quântico envolvendo spin

O efeito Hall quântico de spin (QSHE, *do inglês quantum spin Hall effect*) é, a princípio, similar ao efeito Hall quântico pois, ambos ocorrem em semicondutores bidimensionais a baixas temperaturas e ambos exibem condutância Hall quantizadas. No entanto, assim como no SHE, o QHSE surge a partir do acoplamento spin-órbita do material. Porém, neste fenômeno, cada borda apresenta no mínimo 2 canais de condução. Isto é, ao longo do eixo de cada borda, existem pares de estados que conduzem corrente de spin polarizada que se propagam em direções opostas[4, 5, 6, 34]. Estes estados são comumente conhecidos na literatura como estados de borda hélicos. A Fig.6 ilustra esta situação, em que a cor vermelha representa o estado de borda da corrente de spin-down (digamos,  $|\psi_{-}\rangle$ ) propagando numa direção e a cor azul o estado de spin-up (digamos,  $|\psi_{+}\rangle$ ) propagando-se na outra direção. Além disso, enfatizamos na Fig.6 que a estrutura de banda que representa o QSHE é caracterizado por cones de Dirac em cada uma das bordas do material. Como consequência, uma dada energia  $\epsilon$  desta estrutura de bandas, caracteriza  $|\psi_{-}^j\rangle$  e  $|\psi_{+}^j\rangle$  como pares degenerados, conhecidos como pares de Kramer. A propósito, como consequência do teorema de Kramer [4, 5] é impossível espalhar elasticamente um estado de  $|\psi_{-}\rangle$  num de  $|\psi_{+}\rangle$  através de uma impureza não magnética. Em outras palavras, devido a simetria de reversão temporal, estes estados estão impedidos de retro-espalharem mesmo em presença de potencial de impureza (escalar) ou devido a falhas geométricas nas bordas do material. Caso estes pares se misturem, haverá interferência destrutiva de suas respectivas funções de onda. Entretanto, em presença de potenciais de impurezas magnéticas, os estados experimentam espalhamento inelástico e a simetria de reversão temporal é quebrada. Consequentemente, as interferências entre as funções de onda não são mais destrutivas e, portanto, ocorre retroespalhamento. Assim, um estado de borda (por exemplo,  $|\psi_{+}\rangle$ ) pode espalhar para o outro estado ( $|\psi_{-}\rangle$ ) desta mesma borda.

Para finalizar esta breve discussão, enfatizamos que o QSHE é caracterizado pela condução que ocorre somente pelas bordas do material. Isto porque, os estados no interior do material que apresenta este fenômeno, não são condutores. Portanto, isto implica que a estrutura de banda apresenta um gap na região central do material (como ilustra a Fig.6) e que o sistema seja isolante nesta região. Devido a esta propriedade, materiais que apresentam este fenômeno receberam o nome de isolantes topológicos. Na seção a seguir, comentamos com mais detalhes sobre o estudo envolvendo topologia e como esta definição se aplica a física e se relaciona com o fenômeno de efeito Hall quântico.

## 1.2 Topologia e efeito Hall quântico

Nesta seção, discutimos brevemente sobre como classificar as distintas fases topológicas. Depois, discutimos mais especificamente sobre os isolantes topológicos e o modelo BHZ.



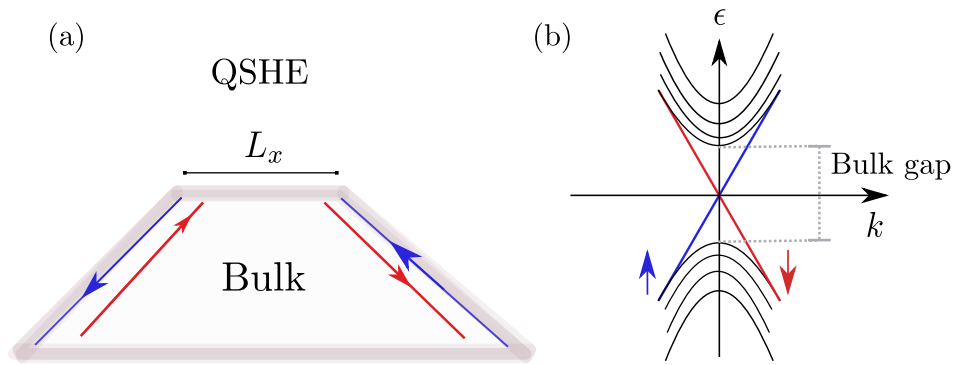


Figura 6 – Representação do estado quântico de spin Hall. Esse sistema é caracterizado por canais de condução de spin que possui quiralidade oposta em cada borda. Como a condução só ocorre nas bordas do material, estrutura de bandas deste sistema apresenta gap na região de bulk.

### 1.2.1 Topologia

A topologia é um ramo da matemática que classifica como formas geométricas podem ser deformadas sem que sua característica principal seja alterada. Por exemplo, segundo essa topologia, uma esfera maciça pode ser moldada suavemente até se tornar um taco de baseball, ou até mesmo num cubo. Apesar destas três geometrias serem estruturalmente distintas, a topologia as classifica através do genus ( $g$ ) que cada uma possui.  $g$  é o número de furos que uma geometria apresenta. Do exemplo citado, a esfera, o taco de baseball e o cubo possuem  $g = 0$  e portanto, pertencem a mesma classe topológica. Entretanto, em nenhum destes casos somos capazes de obter um toro ( $g = 1$ ) sem que seja feita uma ruptura em cada uma dessas geometrias. Quando isto acontece, dizemos que estes objetos possuem fases topológicas distintas e que portanto não pertencem a mesma classe topológica.

Em analogia, na física da matéria condensada utilizamos a topologia para classificar diferentes fases da matéria[35]. Para que isto fique mais claro, vamos retomar alguns conceitos abordados sobre o efeito Hall quântico. Em seções anteriores, enfatizamos que este fenômeno é caracterizado por estados que conduzem corrente nas bordas de um material. No caso do QHE, essa condução é quantizada e está relacionada ao preenchimento dos níveis de energia de Landau que em particular, não é afetado quando o Hamiltoniano do sistema muda suavemente. Isto é, quando esta mudança inclui potenciais de impureza que causam desordem, potenciais de confinamento não simétricos, etc. Em outras palavras, a condução  $\nu e^2/h$  ocorre mesmo quando há deformações no Hamiltoniano. Neste caso em particular, as fases topológicas são classificadas pelos valores inteiros de  $\nu$  e podem ser compreendidos como um análogo ao genus  $g$  discutido anteriormente.

Para o fenômeno QSHE, os níveis de Landau surgem devido ao acoplamento spin-órbita do material. Como em cada borda há dois canais de condução permitidos, a quantização desta condução é em termos de  $2 \times \nu e^2/h$ . Sendo a discussão análogo ao parágrafo anterior,

podemos dizer que o QSHE também apresenta propriedades topológicas relacionadas aos seus estados de condução.

Por fim, para compreender isto em termos de energia, considere dois Hamiltonianos ( $H_1$  e  $H_2$ ) e suponha que ambos são isolantes triviais (i.e., são caracterizados por um gap em suas estruturas de banda). Se formos capazes de transformar  $H_1$  em  $H_2$  sem que ocorra o fechamento de um gap, estes isolantes são ditos topologicamente equivalentes. No entanto, se ao converter  $H_1$  em  $H_2$  o gap se fecha, e depois reabre, dizemos que houve uma transição de fase e estes Hamiltonianos pertencem a duas fases topológicas distintas. Em particular, esta reabertura é definida por inversão de bandas que caracterizam esse estado isolante como sendo não trivial.

### 1.2.2 Isolantes topológicos

A princípio, podemos associar a teoria sobre estados de borda do QHE e do QSHE e afirmar que ambos são isolantes topológicos[36]. Isso porque tanto o QHE quanto QSHE conduzem corrente na borda, enquanto que no bulk são isolantes. O motivo é simples. Para que o fenômeno do QHE surja, é necessária a aplicação de um intenso campo magnético externo sobre o material. Isso é um fator limitante para seu uso prático em aplicações tecnológicas. Como o QSHE surge devido ao SOC, sistemas com este fenômeno tem grande vantagem sobre o QHE.

Desde a descoberta do QSHE, diversos pesquisadores vem propondo dispositivos eletrônicos que explorem de forma eficiente suas propriedades[11, 37, 38]. Em 2006, Bernevig, Hughes, e Zhang (BHZ) propuseram que este efeito surgiria em um poço quântico formado por HgTe e CdTe[4, 5, 10]. Este poço é formado por uma heteroestrutura constituída de folhas de HgTe entre folhas de CdTe. Estes compostos formam um semiconductor cristalino cuja a estrutura da rede é do tipo zincblende. Este tipo rede é interpretado como duas redes cúbicas de face centrada interpenetradas uma na outra.

A fase de QSHE observada neste semiconductor, deve-se a ao CdTe e ao HgTe apresentarem bandas invertidas uma relação a outra. Sendo mais específico, o CdTe é um composto em que o SOC é fraco e as bandas são de ordenamento normal (isto significa que sua banda de condução é formada por elétrons dos orbitais s enquanto a de valência dos orbitais p). Já o HgTe, o SOC é extremamente forte e sua estrutura de banda é invertida (ou seja, sua banda de condução é formada por elétrons<sup>3</sup> dos orbitais p enquanto a de valência dos orbitais s). Ao controlar a espessura da folha de HgTe, há um alargamento do poço quântico formado pela heteroestrutura, de maneira que os níveis de energia  $E_1$  e  $H_1$  do poço de HgTe se cruzem, veja Fig.7. Feito isto, surge uma transição de fase topológica[4, 5](da fase de isolante trivial para a não trivial), o que implica no

<sup>3</sup> Na verdade, como a banda do HgTe está invertida em relação ao CdTe, dizemos que os estados no interior do poço devido ao HgTe são representados por buracos.

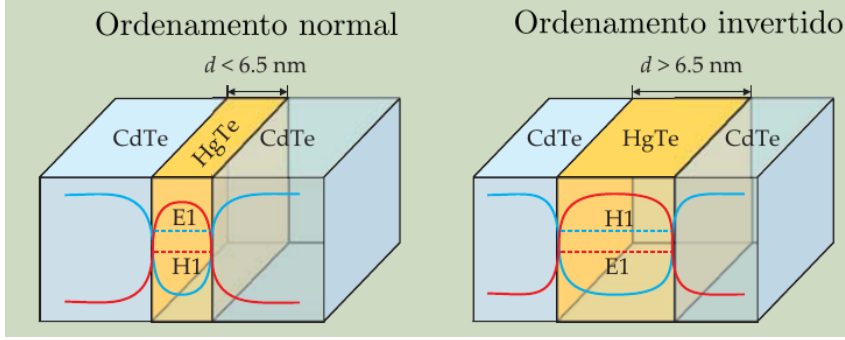


Figura 7 – Poço quântico formado por telureto de mercúrio. A figura ilustra a inversão de bandas no interior do poço quando as camadas de tHgTe atinge uma espessura crítica  $d_c$ . Fonte: Zhang[6] (2010)

surgimento de estados de borda que dão origem ao QSHE. O comprimento crítico para que essa transição ocorra é  $d_c = 6.3nm$ , como ilustra a Fig.7.

Para representar esta situação matematicamente, podemos analisar as interações entre as bandas de condução e de valência por meio do método  $k \cdot p$ . Para esta formulação, é suficiente considerar os estados degenerados definidos pelos estados  $|E_1, \uparrow\rangle, |E_1, \downarrow\rangle, |H_1, \uparrow\rangle, |H_1, \downarrow\rangle$ , como indicados na Fig.7. O Hamiltoniano efetivo que descreve os elétrons confinados no poço de HgTe nesta base é[4]

$$H = \epsilon(k)\mathbb{1} + \begin{pmatrix} M - Bk^2 & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -(M - Bk^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - Bk^2 & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -(M - Bk^2) \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

onde  $\epsilon(k) = C + Dk^2$ . Este Hamiltoniano (modelo BHZ), é bloco diagonal e representa os elétrons de spin-up (bloco  $2 \times 2$  superior) e spin-down (bloco  $2 \times 2$  inferior) das bandas de condução e valência do sistema. As constantes  $A, B, C, D$  são parâmetros do material[10, 39] e o termo massivo  $M$  representa o gap entre as bandas do sistema.

### 1.3 Organização da dissertação

No capítulo 2 é apresentada uma breve revisão teórica dos métodos utilizados nesta dissertação. Inicialmente, descrevemos a origem das equações que descrevem sistemas de isolantes topológicos por meio da equação de Dirac (seção 2.1), seguindo para as soluções analíticas dos casos unidimensional e bidimensional (seção 2.2. e seção 2.3) e também sobre como solucionar numericamente estes tipos de sistemas (seção 2.4). Após esta revisão, finalizamos o capítulo com os conceitos que envolvem sistemas mesoscópicos, bem como o formalismo matriz de espalhamento (seção 2.4) e de Landauer (seção 2.5). No capítulo 3, apresentamos todos os casos estudados neste trabalho, a metodologia

utilizada e os resultados mais importantes. Finalmente, no capítulo 4, apresentamos nossas conclusões gerais e perspectivas.

## 2 Fundamentos teóricos e metodologia

Na primeira parte desta seção, nos dedicamos a deduzir de maneira rápida, a equação de Dirac. Existem duas maneiras comuns de se encontrar a equação de Dirac. Aqui nós mostramos somente uma delas (para mais detalhes sobre esta e a outra derivação, consulte a referência[40]). A dedução desta equação será nosso ponto de partida para estudar o Hamiltoniano do modelo BHZ. Em seguida, solucionamos analiticamente este Hamiltoniano para os casos unidimensionais (1D) e bidimensionais (2D). Para o caso 1D, solucionamos um fio semi-infinito considerando as aproximações lineares e quadráticas em  $k$ . Obtemos em cada aproximação, as expressões correspondentes ao comprimento de penetração da função de onda dos estados de borda. Para o sistema 2D, solucionamos um plano semi-infinito. Para finalizar esta primeira etapa, explicamos porque a aproximação quadráticas em  $k$  é importante em Hamiltonianos tipo Dirac.

Na segunda parte desta seção, abordamos sobre os conceitos de transporte eletrônico. Nossa discussão se inicia introduzindo o que é o regime balístico e seguimos para o cálculo da matriz de espalhamento  $S$  e de transferência  $T$ . Além dessas matrizes, mostramos como calcular o operador de densidade de corrente para Hamiltonianos quadráticos e tipo Dirac. Após isso, solucionamos um exemplo (caso geral) de um sistema trivial parabólico para calcular a corrente que atravessa uma amostra de tamanho finito. A intenção de solucionar este exemplo, é deduzir a expressão da condutividade segundo o formalismo de Landauer. Por fim, solucionamos um outro exemplo (tanto analiticamente quanto numericamente) para o caso do Hamiltoniano tipo Dirac unidimensional e discutimos brevemente como utilizar o pacote Kwant para simular um sistema bidimensional e calcular a condutância entre dois contatos terminais.

### 2.1 A equação de Dirac

Para encontrar a equação de Dirac, devemos encontrar Hamiltonianos  $H$  linear em  $k$  cujo os autovalores correspondem as energias relativísticas,

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad (2.1)$$

sendo  $p$  o momento,  $c$  a velocidade da luz no vácuo e  $m$  é a massa de repouso. Ao invés de simplesmente substituir o momento  $p$  pelo seu operador correspondente, i.e.  $p = -i\hbar\nabla$ , vamos reescrever expressão da Eq. (2.1) como

$$\begin{aligned} H^2 &= E^2 = P^2 c^2 + m^2 c^4 = \left( c\alpha_x p_x + c\alpha_y p_y + c\alpha_z p_z + \beta m c^2 \right)^2 \\ &= \left( c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2 \right)^2. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Feito isso, devemos determinar  $\alpha$  e  $\beta$ . Substituindo  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  em ambos os lados da Eq. (2.2) e comparando termo a termo, encontramos:

$$\begin{aligned} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)c^2 + m^2c^4 = c^2 \sum_{i=x,y,z} \alpha_i^2 p_i^2 + c^2 \left[ \{\alpha_x, \alpha_y\} p_x p_y + \{\alpha_x, \alpha_z\} p_x p_z + \right. \\ \left. \{\alpha_y, \alpha_z\} p_y p_z \right] + mc^3 \sum_{i=x,y,z} \left( \{\alpha_i, \beta\} \right) P_i + \beta^2 m^2 c^4, \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde  $\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i$  se  $i \neq j$  e  $\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i \beta + \beta \alpha_i$  são as relações de anticomutação para  $\alpha$  e  $\beta$ . Note que quando fatoramos  $p$ , consideramos que  $[p_i, \alpha_i] = 0$  e  $[p_i, \beta] = 0$ . Em outras palavras, isso é o mesmo que afirmar que  $\alpha_i$  e  $\beta$  não dependem da posição. Além disso, ao comparar ambos os lados da Eq.(2.3), somente o primeiro e o último termo sobrevivem, e como consequência, encontramos

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \{\alpha_i, \beta\} = 0, \quad (2.4)$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2. \quad (2.5)$$

Para o caso em questão, como estamos descrevendo o Hamiltoniano que representa a Eq. (2.1),  $\alpha$  e  $\beta$  serão matrizes hermitianas. A única maneira de atenderem esta condição e aquelas impostas na Eq.(2.5) é se  $\alpha$  e  $\beta$  forem matrizes  $4 \times 4$  representadas pelas matrizes de Pauli  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ , isto é,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

sendo,

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \quad e \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

A partir das considerações discutidas logo acima, concluímos que  $H$  deve ser uma matriz  $4 \times 4$  representada pela equação

$$H = \left( c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2 \mathbf{1}_{4 \times 4} \right). \quad (2.8)$$

Se agora substituirmos o operador  $p \rightarrow -i\hbar\nabla$  e considerar um caso geral onde a velocidade  $c$  é uma velocidade qualquer  $v$ , a Eq. (2.8) torna-se

$$H = \left( -i\hbar v \nabla \right) \cdot \alpha + m\beta, \quad (2.9)$$

onde, por simplicidade, encapsulamos o valor do produto  $mv$  representado-o somente pelo termo massivo (i.e.  $mv \rightarrow m$ ).

A dedução feita acima para o Hamiltoniano da Eq. 2.9, é um modelo que descreve a relação de dispersão relativística de elétrons e pósitrons[28, 40]. No entanto, os modelos que descrevem os isolantes topológicos são semelhantes à Eq. 2.9 e por este motivo, seus

Hamiltonianos são comumente chamados de Hamiltonianos tipo Dirac. Vale ressaltar que no modelo de Dirac para elétrons e pósitrons, não há correções quadráticas em sua equação[28], pois isto altera a relação de dispersão destas partículas. As discussões das condições de contorno, e tudo que se segue a partir daqui, é aplicado somente para os materiais semicondutores que apresentam Hamiltonianos do tipo de Dirac (e.g., grafeno, isolantes topológicos, férmions de Weyl).

A Eq. 2.9 é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem (E.D.O.) pois,  $k \propto \partial_x$ . Este fato desencadeia algumas dificuldades no momento em que calculamos sua solução, tanto de forma numérica<sup>1</sup> quanto analiticamente. Isso porque, esta E.D.O. não permite que a condição de contorno para a função de onda seja aquela que comumente é utilizada quando  $H \propto k^2$ , isto é,  $\psi = 0$  na interface. Em outras palavras, a Eq. 2.9 não admite que a função  $\psi$  se anule trivialmente. Para solucionar este problema, é necessário considerar que a função envelope deste  $\psi$  seja uma função descontínua quando se aproxima da borda, ou seja  $\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_0(\mathbf{r})[1 - \Theta(\mathbf{r})]$ , onde  $\Theta$  é a função Heaviside. Feito isto, as condições de contorno para  $\psi$  são calculadas por meio da equação  $[U_k \pm iU_c]\psi(x = \pm L)$ , primeiramente introduzido por Berry & Mondragon[41].  $U_k$  representa a matrizes do Hamiltoniano que multiplicam o termo cinético e  $U_c$  a matriz de confinamento do sistema. O sinal ( $\pm$ ) indica as bordas da direita (+) e da esquerda (-) em  $x = \pm L$ . (Para uma discussão mais detalhada sobre este assunto, veja a referência[42]). Por meio desta abordagem, obtém-se a estrutura de banda exata do Hamiltoniano da Eq.(2.9). Como o foco deste trabalho não está em mostrar como adicionar um termo  $k^2$  neste Hamiltoniano, faremos isto de maneira *ad-hoc*. Ao fazer  $H \propto k^2$ , admite-se que  $\psi$  (e sua primeira derivada  $\partial_x\psi$ ) são contínuas e que  $\psi$  desaparece na borda. Caso o leitor tenha interesse em saber como acrescentar este termo sem que haja nenhuma consequência negativa sobre o sistema estudado (e.g. quebras de simetria), convido a ler nosso artigo[42] intitulado como *Interplay between boundary conditions and Wilson's mass in Dirac-like Hamiltonians*. Portanto, a Eq.(2.9) torna-se

$$H = -iv\alpha\hbar\nabla + m\beta + \left(B\hbar^2\nabla^2\right)\beta. \quad (2.10)$$

### 2.1.1 Soluções da equação de Dirac

Para explorar as propriedades relacionadas aos isolantes topológicos, precisamos solucionar o Hamiltoniano da Eq. (2.10) do modelo BHZ. Neste trabalho nós fazemos isto de maneira gradual. Portanto, vamos começar comentando sobre a solução de um sistema unidimensional na direção  $\hat{y}$ . Para o caso em que  $H \propto k$ , encontramos a função de onda  $\psi$  de forma geral. Em seguida, seguimos para o caso  $H \propto k^2$ , consideramos um fio semi-infinito em  $y \leq 0$  e encontramos a função de onda que satisfaz as condições de contorno

<sup>1</sup> Note: esta afirmação se refere a dificuldade de solucionar Hamiltonianos tipo Dirac (i.e., lineares em  $k$ ) por meio do método de diferenças finitas, pois este método desencadeia o problema de duplicação de férmions neste tipo de Hamiltoniano. Abordamos com mais detalhes sobre este problema ao longo deste capítulo.

em  $y = 0$  e  $y \rightarrow -\infty$ . Após estudar ambos os regimes para o caso unidimensional (i.e. aproximação linear e quadrática em  $k$ ), seguimos para o sistema bidimensional. Nesta etapa, também solucionamos situações envolvendo  $H \propto k$  e  $H \propto k^2$ . Para este último caso, nosso sistema é um semi-plano bidimensional em  $y \leq 0$  e também deve satisfazer as condições de contorno  $y = 0$  e  $y \rightarrow -\infty$ .

### 2.1.1.1 Caso unidimensional e linear em $k$

Para tratar de um sistema unidimensional na direção  $y$ , consideramos  $k_x = 0$  na Eq.(2.9),

$$H(k_y) = Ak_y\alpha_y + M\beta, \quad (2.11)$$

sendo  $A = v\hbar$ , em que  $v$  é a velocidade de Fermi,  $k_y = -i\partial_y$  e  $M$  o termo massivo de Dirac. Ao definir  $\alpha_y = (\sigma_z \otimes \sigma_y)$  e  $\beta = (\sigma_z \otimes \sigma_z)$  de modo que as relações da Eq. (2.5) sejam satisfeitas, o Hamiltoniano  $H(k_y)$  torna-se uma matriz  $4 \times 4$  bloco diagonal, i.e.,  $H_{4 \times 4}(k_y) = h_{2 \times 2}(k_y) \oplus h_{2 \times 2}^*(-k_y)$ . Cada um destes blocos  $2 \times 2$  corresponde a um tipo de spin: o bloco superior representa o spin-up ( $|\psi_+(y)\rangle = [\phi_{E1,\uparrow}(y), \phi_{H1,\uparrow}(y)]^T$ ) enquanto que bloco inferior o spin-down ( $|\psi_-(y)\rangle = [\phi_{E1,\downarrow}(y), \phi_{H1,\downarrow}(y)]^T$ ). A menos da simetria de reversão temporal, estas matrizes  $2 \times 2$  são semelhantes. Portanto, só é necessário solucionar  $h(k_y)|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$  de um único bloco  $2 \times 2$  para investigar a física do problema.

Dada estas considerações, devemos solucionar  $h(k_y)|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$ , i.e.,

$$\begin{pmatrix} M - \epsilon & -iAk_y \\ +iAk_y & -M - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{E1,\uparrow} \\ \phi_{H1,\uparrow} \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \begin{cases} \phi_{E1,\uparrow}(y) = \left[ \frac{iAk_y}{M - \epsilon} \right] \phi_{H1,\uparrow}(y) \\ \phi_{H1,\uparrow}(y) = \left[ \frac{iAk_y}{M + \epsilon} \right] \phi_{E1,\uparrow}(y). \end{cases} \quad (2.12)$$

Ao substituir  $k_y = -i\partial_y$  e  $\phi_{H1,\uparrow}(y)$  em  $\phi_{E1,\uparrow}(y)$  (ou vice-versa), encontramos a equação diferencial de segunda ordem,

$$\phi_{E1,\uparrow}(y) = - \left( \frac{A^2}{M^2 - \epsilon^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial y^2} \phi_{E1,\uparrow}(y) = -\lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \phi_{E1,\uparrow}(y). \quad (2.13)$$

Sendo  $\phi(y) \propto e^{\lambda y}$ , a solução para  $\phi_{E1,\uparrow}(y)$  e  $\phi_{H1,\uparrow}(y)$  fica,

$$\phi_{E1,\uparrow}(y) = c_+ e^{\lambda y} + c_- e^{\lambda - y}, \quad (2.14)$$

$$\phi_{H1,\uparrow}(y) = \frac{A}{M + \epsilon} \left[ \lambda_+ c_+ e^{\lambda y} + \lambda_- c_- e^{\lambda - y} \right], \quad (2.15)$$

O valor de  $\lambda$  é  $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{(M^2 - \epsilon^2)/A^2}$ . Para  $y \rightarrow -\infty$ , a função de onda deve ir a zero, portanto obtemos  $c_- = 0$ . Já em  $y = 0$ , a condição de contorno de BM[41, 42] é  $[\sigma_y + i\sigma_z]\psi_+(0) = 0$ . Aplicando esta condição nas soluções gerais acima, obtemos  $\epsilon = 0$ . Portanto,  $\lambda_{\pm} = \pm M/A$ . Assim, a solução final fica

$$\psi_+(y) = \begin{pmatrix} c_+ \\ A \\ \frac{c_+}{M} \end{pmatrix} e^{\lambda y}, \quad (2.16)$$



sendo  $c_+$  uma constante de normalização.

Desta solução, vemos que o comprimento de penetração dos estados de borda é  $l_k^{-1} = |\lambda_+|$ . Os parâmetros que utilizamos neste trabalho (baseados na ref.[39]) são do Hamiltoniano BHZ, i.e.,  $M = -10[meV]$  e  $A = 375[meV nm]$ . Portanto, o comprimento de penetração do estado de borda torna-se

$$l_k = |A/M| \approx 37.5nm. \quad (2.17)$$

### 2.1.1.2 Caso unidimensional e quadrático em $k$

Para este caso, a equação de interesse é a Eq.(2.10) em que  $k_x = 0$ . Como no caso anterior, estamos interessados em solucionar somente num único bloco  $2 \times 2$  para o spinor  $psi_+(y) = [\phi_{E1,\uparrow}(y)\phi_{H1,\uparrow}(y)]^T$ . Sendo assim,  $h(k_y)$  para esta situação torna-se

$$h(k_y) = E_0(k_y)\mathbb{1}_{2 \times 2} + d^j(k_y)\sigma^j, \quad j = 1, 2, 3, \quad (2.18)$$

em que  $E_0(k_y) = C - Dk_y^2$ ,  $d^1 \propto k_x \rightarrow 0$ ,  $d^2 = Ak_y$ ,  $d^3 = M(k_y) = M - Bk_y^2$  e  $\sigma^1 = \sigma_x$ ,  $\sigma^2 = \sigma_y$ ,  $\sigma^3 = \sigma_z$ . Aqui,  $A$  e  $k_y$  possuem a mesma definição apresentada anteriormente, e  $C$  e  $D$  são parâmetros constantes deste Hamiltoniano. Para solucionar a equação  $h(k_y)\psi_+(y) = \epsilon\psi_+(y)$  escrevemos,

$$\begin{pmatrix} C - Dk_y^2 + M - Bk_y^2 - \epsilon & -iAk_y \\ +iAk_y & C - Dk_y^2 - M + Bk_y^2 - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{E1,\uparrow} \\ \phi_{H1,\uparrow} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.19)$$

e conseqüentemente,

$$\begin{cases} (-B_+k_y^2 + M - \epsilon)\phi_{E1,\uparrow} + (-iAk_y)\phi_{H1,\uparrow}(y) = 0 \\ (+iAk_y)\phi_{E1,\uparrow} - (B_-k_y^2 - M - \epsilon)\phi_{H1,\uparrow}(y) = 0 \end{cases}, \quad (2.20)$$

sendo  $B_{\pm} = (B \pm D)$ . Supondo  $\phi_{E1,\uparrow} \propto c_1e^{\lambda y}$  e  $\phi_{H1,\uparrow} \propto c_2e^{\lambda y}$ , trocando  $k_y \rightarrow -i\partial_y$ , e substituindo na Eq. (2.19) obtemos,

$$\begin{pmatrix} B_+\lambda^2 + M - \epsilon & -iA\lambda \\ +iA\lambda & -B_-\lambda^2 - M - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (2.21)$$

Esta equação matricial determina o valor de  $\lambda$ . Para encontrar seu valor, a matriz da Eq. (2.21) deve satisfazer a condição  $det[...] = 0$ . Ao fazer isto,  $\lambda$  fica determinado pela solução da equação biquadrada,

$$\lambda^4 - \left( \frac{A^2 - 2BM - 2D\epsilon}{2B_+B_-} \right) \lambda^2 + \frac{M^2 - \epsilon^2}{B_+B_-} = 0, \quad (2.22)$$

sendo,

$$\lambda_{\pm}^s = \pm \sqrt{F + s \sqrt{F^2 - \left( \frac{M^2 - \epsilon^2}{B_+B_-} \right)}}, \quad F = \frac{A^2 - 2(BM + D\epsilon)}{2B_+B_-}. \quad (2.23)$$

onde  $s$  representa os sinais  $\pm$  para cada solução de  $\lambda_{\pm}$ .

Antes de encontrar a solução para a função de onda, devemos enfatizar que o sistema analisado é um fio semi-infinito em  $y \leq 0$  e que o Hamiltoniano é  $H \propto k_y^2$ . Sendo assim, sua função onda admite que a condição de contorno seja  $\psi_+(y=0) = \psi_+(y=-\infty) = 0$ . No entanto, como supomos que  $\phi(y) \propto e^{\lambda y}$ , estas condições só são satisfeitas quando  $Re(\lambda_{\pm}^S) > 0$ . Portanto  $\lambda_-^S$  deve ser descartado. Além disso, como no caso anterior, as condições de contorno impõe  $\epsilon = 0$ . Assim, sob estas considerações  $\psi_+(y)$  é dada pela seguinte expressão<sup>2</sup>:

$$\psi_+(y) = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (e^{\lambda_+ y} - e^{\lambda_- y}), \quad (2.24)$$

onde  $N$  é a constante de normalização.

O comprimento de penetração será o maior valor entre  $\lambda_+^{S=+}$  e  $\lambda_+^{S=-}$ . Substituindo os valores dos parâmetros, i.e.,  $A = 375[meV \text{ nm}]$ ,  $B = -1120[meV \text{ nm}^2]$ ,  $M = -10[meV]$  e  $D = 0[meV \text{ nm}^2]$ , verificamos que  $\lambda_+^{S=-} > \lambda_+^{S=+}$ , assim o comprimento de penetração  $l_{k^2}$  fica,

$$l_{k^2} = \left( \sqrt{F} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \frac{M^2}{F^2 B^2}}} \right)^{-1} \approx 34.2 \text{ nm}. \quad (2.25)$$

Apesar de  $l_{k^2} \approx 34.2 \text{ nm} < l_k \approx 37.5 \text{ nm}$ , esta diferença entre estes comprimentos é muito pequena e não interfere significativamente na análise do sistema.

### 2.1.1.3 Caso bidimensional e linear em $k$

Em duas dimensões, estamos interessados em solucionar um plano semi-infinito em  $y \leq 0$  e invariante na direção  $x$ . Neste caso, o Hamiltoniano fica escrito como,

$$H(kx, ky) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

sendo

$$h(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) \mathbb{1}_{2 \times 2} + d^j(\mathbf{k}) \sigma^j, \quad (2.27)$$

em que  $E_0(\mathbf{k}) = C = 0$ ,  $d^1(\mathbf{k}) = Ak_x$ ,  $d^2(\mathbf{k}) = Ak_y$ ,  $d^3(\mathbf{k}) = M$  e  $\sigma^1 = \sigma_x$ ,  $\sigma^2 = \sigma_y$ ,  $\sigma^3 = \sigma_z$ . Seguindo o raciocínio aplicado nas duas seções anteriores, ao escrever a equação de autovalores como  $h(\mathbf{k})\psi_+(x, y) = \epsilon\psi_+(x, y) = 0$ , sendo  $\psi_+(x, y) = [\psi_1(x, y) \ \psi_2(x, y)]^T$  encontramos a seguinte equação matricial,

$$\begin{pmatrix} M - \epsilon & A(k_x - ik_y) \\ A(k_x + ik_y) & -M - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(kx, y) \\ \psi_2(kx, y) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.28)$$

<sup>2</sup> Para o cálculo mais detalhado, veja o apêndice C

Atuando esta matriz sobre o vetor  $[\psi_1(x, y) \ \psi_2(x, y)]^T$  obtemos,

$$\begin{cases} \psi_1(kx, y) = -[A(k_x - ik_y)/(M - \epsilon)]\psi_2(kx, y) \\ \psi_2(kx, y) = +[A(k_x + ik_y)/(M + \epsilon)]\psi_1(kx, y) \end{cases} \quad (2.29)$$

Ao fazer  $k_y = -i\partial_y$  e substituir  $\psi_1(kx, y)$  em  $\psi_2(kx, y)$  na Eq. (2.29), obtemos

$$\partial_y^2 \psi_1(kx, y) = \lambda^2 \psi_1(kx, y), \quad \lambda = \pm \sqrt{\frac{M^2 - \epsilon^2}{A^2} + k_x^2}. \quad (2.30)$$

Para solucionar esta equação, assumimos que as condições dadas no início deste problema nos garante que  $\psi_1(kx, y) \propto e^{ik_x x} \phi_{E1,\uparrow}(y)$ . Assim, a Eq. (2.30) torna-se  $\partial_y^2 \phi_{E1,\uparrow}(y) = \lambda^2 \phi_{E1,\uparrow}(y)$ , sendo sua solução

$$\phi_{E1,\uparrow}(y) = c_+ e^{\lambda y} + c_- e^{-\lambda y}, \quad (2.31)$$

e portanto,

$$\psi_1(kx, y) = \left( c_+ e^{\lambda y} + c_- e^{-\lambda y} \right) e^{ik_x x}. \quad (2.32)$$

Para encontrar a expressão de  $\psi_2(kx, y)$ , basta introduzir a Eq.(2.30), i.e.,

$$\psi_2(kx, y) = \frac{A}{M + E} (kx + \partial_y) \psi_1 \quad (2.33)$$

$$= \frac{A}{M + E} (kx + \partial_y) \left( c_+ e^{\lambda y} + c_- e^{-\lambda y} \right) e^{ik_x x} \quad (2.34)$$

Aqui, novamente não iremos encontrar a forma final da função de onda para  $\psi_1(kx, y)$  e  $\psi_2(kx, y)$ . Iremos calcular sua expressão final na seção a seguir, para o caso  $H \propto k^2$ .

Para este caso, o comprimento de penetração<sup>3</sup> é

$$l_k^{2d} = \left( \sqrt{\frac{M^2 - \epsilon^2}{A^2} + k_x^2} \right)^{-1}. \quad (2.35)$$

#### 2.1.1.4 Caso bidimensional e quadrático em $k$

Para solucionar o caso bidimensional com correções quadráticas em  $k$ , consideramos o Hamiltoniano da Eq. (2.26) sendo  $h(\mathbf{k})$  escrito como<sup>4</sup>

$$h(\mathbf{k}) = \left[ Ak_y \sigma_y + (M - Bk_y^2) \sigma_z \right] + \left[ Ak_x \sigma_x - Bk_x^2 \sigma_z \right] = h(k_y) + h(k_x). \quad (2.36)$$

Esse sistema apresenta invariância na direção  $x$ , portanto  $[H(kx, ky), kx] = 0$ . Assim, vamos solucionar a equação de autovalores  $\det[(h(\mathbf{k}) - \epsilon)]\psi_+(x, y) = 0$  supondo que

$$\psi_+(x, y) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \phi(y) e^{ik_x x}. \quad (2.37)$$

<sup>3</sup> Note que se  $k_x = 0$  e  $\epsilon = 0$  nesta equação, retornamos ao resultado da Eq. (2.17)

<sup>4</sup> Para encontrar a Eq (2.36), consideramos as simplificações  $C = D = 0$ . Vale ressaltar que valores de  $D \neq 0$  geram assimetria nas bandas de condução e valência do sistema analisado.

Novamente, se substituirmos  $k_y = -i\partial_y$  e  $\phi(y) \propto e^{\lambda y}$  nesta Eq. (2.37), encontramos a seguinte expressão matricial,

$$\begin{pmatrix} -B(kx^2 - \lambda^2) + M - \epsilon & A(kx + \lambda) \\ A(kx - \lambda) & B(kx^2 - \lambda^2) - M - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (2.38)$$

A partir desta equação, obtemos os valores de  $\lambda$  como sendo

$$\lambda_{\pm}^S = \pm \sqrt{k_x^2 + F + S \sqrt{F^2 - \left(\frac{M^2 - \epsilon^2}{B^2}\right)}}, \quad F = \frac{A^2 - 2BM}{2B^2}. \quad (2.39)$$

sendo  $S = \pm 1$ . Semelhantemente ao caso anterior, para que as condições de contorno  $\psi_+(y=0) = \psi_+(y=-\infty) = 0$  sejam satisfeitas, é necessário que  $Re(\lambda_{\pm}^S) > 0$ . Portanto, devemos descartar a opção  $\lambda_-^S$ . Note que agora o comprimento de penetração  $l_{k^2}^{2d} = \lambda^{-1}$  depende de  $k_x$ . Para  $\epsilon = k_x = 0$ , o valor deste comprimento é o mesmo que o calculado na Eq.(2.25).

Para encontrar as autoenergias deste sistema trataremos  $h(k_x)$  da Eq. (2.36) como um termo perturbativo. Para isto, utilizamos a Eq. (2.24) como base para e calculamos a autoenergia  $\epsilon_x$  como sendo

$$\epsilon_x^{\pm} = \langle \psi_i | h(kx) | \psi_j \rangle = \pm Ak_x \delta_{i,j}. \quad (2.40)$$

O sinal (+) representa a autoenergia do autoestado de spin-up e o sinal (-) a do autoestado de spin-down. Por fim, escrevemos solução final da função de onda como<sup>5</sup>

$$\psi_+(y) = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (e^{\lambda+y} - e^{\lambda-y}) e^{ik_x x}. \quad (2.41)$$

## 2.2 Solução numérica para Hamiltonianos lineares em k

Na seção anterior, vimos que o hamiltoniano de um isolante topológico pode ser descrito a partir da equação de Dirac. Nesta seção, iremos mostrar como solucionar estes tipos de Hamiltoniano via método de diferenças finitas. Abordaremos sobre o problema da duplicação de férmions[43] quando aplicamos este método em Hamiltonianos lineares em  $k$  e também sobre a importância de adicionar o termo  $k^2$  na Eq. (2.9) para evitar o surgimento deste problema. Caso o leitor tenha interesse e deseje saber mais detalhes sobre este assunto recomendo as referências[42, 43].

### 2.2.1 Método das diferenças finitas e o problema da duplicação de férmions

Pra solucionar a equação de Schrodinger  $H\psi(x) = \epsilon\psi(x)$  numericamente, precisamos reescrever a derivada  $\partial_x\psi(x)$  do Hamiltoniano da Eq. (2.9) por sua representação discreta. Para isso, precisamos expandir uma função em série de Taylor e isolar o termo que

<sup>5</sup> Para detalhes da derivação desta expressão para a função de onda, consulte o apêndice C

representa a derivada. A melhor maneira de fazer isso é escrever a série para  $\psi(x \pm \delta x)$ , i.e.,

$$\psi(x \pm \delta x) = \psi(x) \pm \frac{\partial f}{\partial x} \delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \delta x^2 + \dots \quad (2.42)$$

Ao subtrair  $\psi(x + \delta x) - \psi(x - \delta x)$  encontramos,

$$\frac{\partial \psi_j}{\partial x} = \frac{\psi(x + \delta x) - \psi(x - \delta x)}{2\delta x} \rightarrow \frac{\psi_{j+1} - \psi_{j-1}}{2\delta x} \quad \text{onde } j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.43)$$

onde  $\delta_x$  representa o passo de discretização do sistema.

Portanto, a equação  $H\psi(x) = \epsilon\psi(x)$  torna-se

$$H\psi(x) = -i \frac{A}{2\delta_x} \left( \psi_{j+1} - \psi_{j-1} \right) + M\sigma_z \psi(x) = \epsilon\psi(x). \quad (2.44)$$

Se expandirmos a função de onda numa combinação de ondas planas, ou seja,  $\psi_j(x) = \sum_n C_n e^{iq_n x}$  encontramos que

$$\psi_{j+1} - \psi_{j-1} = \sum_n C_n e^{iq_n x} \left( e^{iq_n \delta x} - e^{-iq_n \delta x} \right) \quad (2.45)$$

$$= 2i \sum_n C_n e^{iq_n x} \sin(q_n \delta x). \quad (2.46)$$

Finalmente, obtemos a seguinte equação de autovalores

$$\sum_n C_n \left[ A \frac{\sin q_n \delta x}{\delta x} \sigma_x + M\sigma_z - \epsilon \mathbb{I} \right] e^{iq_n x} = 0. \quad (2.47)$$

Para que a Eq. (2.47) tenha soluções não triviais, o termo entre os colchetes deve ter determinante igual a zero, i.e.  $\det[\dots] = 0$ . Realizando esta operação, o valor da autoenergia  $\epsilon$  fica

$$\epsilon = \pm \sqrt{A^2 \frac{\sin^2 q_n \delta x}{\delta x^2} + m^2} \quad (2.48)$$

Este resultado da Eq. (2.48) geram os férmions duplicados. Isso pode ser facilmente visualizado no gráfico da Fig.8. Neste gráfico comparamos o resultado do autovalor para o caso contínuo em que onde  $\epsilon = \pm Ak_x$  para  $M = 0$  (Eq. (2.40)), com o caso discreto representado pela Eq. (2.48).

O outro problema que o método das diferenças finitas desencadeia em Hamiltonianos lineares é a imposição da condição de contorno trivial, i.e. que a função de onda vai a zero nas bordas. Esta condição surge naturalmente quando discretizamos a derivada  $\partial_x \psi$ . É fácil verificar que assumimos essa condição de contorno se reescrevemos  $\partial_x \psi$  na sua forma matricial,

$$\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \psi'_3 \\ \vdots \\ \psi'_N \end{pmatrix} = \frac{1}{2\delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 \cdots & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

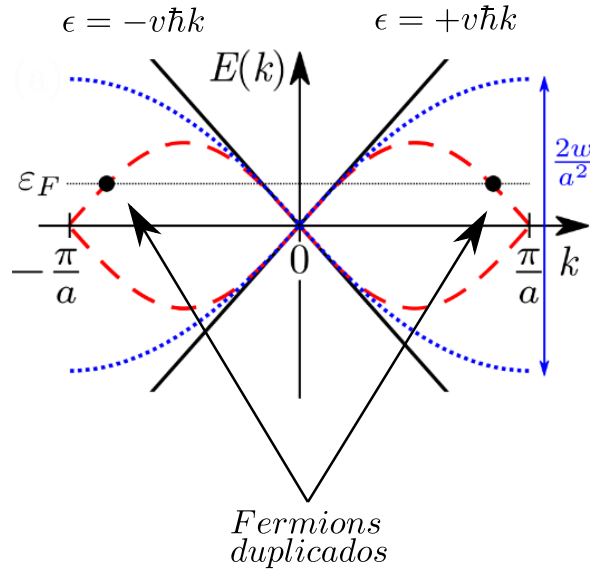


Figura 8 – Estrutura de bandas para Hamiltoniano tipo Dirac. O gráfico em vermelho representa a duplicação de férmions na estrutura de bandas para o Hamiltoniano linear em  $k$  após ser discretizado. O gráfico em azul mostra a abertura do gap após a introdução do termo  $k^2$ . Fonte: B.Messias de Resende[43] - ADAPTADO

Note que o primeiro e o último elemento de matriz correspondem a zero e que portanto,  $\psi_{j=0} = \psi_{j=N+1} = 0$ , onde o primeiro índice  $j = 0$  e o último  $j = N + 1$ , representam a borda em que o sistema está confinado.

### 2.2.2 Contornando o problema da duplicação de férmions

Uma maneira de eliminar a duplicação de férmions, é utilizar a condição de contorno não trivial. Essa proposta foi primeiramente introduzida por Berry & Mondragon[41] (BM) e mais tarde foi discutida principalmente por Brey & Fertig[44]. Nesta proposta, BM tratam a condição de contorno da função de onda por meio da expressão

$$\left(U_k \pm iU_c\right)\psi(\pm L) = \left(\sigma_x \pm iU_c\right)\psi(\pm L) = 0, \quad (2.50)$$

onde  $U_k$  define o termo de energia cinética, que no caso da Eq. (2.8) é  $U_k = \sigma_x$ . A matriz  $U_c$  é a matriz de confinamento e pode ser  $\sigma_y$  ou  $\sigma_z$ . Seu valor depende do perfil de confinamento que o sistema está submetido. A variável  $L$  representa as bordas do sistema.

Uma outra forma de lidar com este problema e ainda considerar condições de contorno triviais para a função, i.e.  $\psi(x = \pm L) = 0$ , é utilizar a massa de Wilson. Essa técnica consiste em adicionar correções quadráticas  $k^2$  no Hamiltoniano[43]. Acrescentar  $k^2$  em  $H$  desempenha um papel fundamental nas simulações numéricas para a eliminação da duplicação de férmions. Um breve porquê disto está justificado a seguir. Para mais detalhes consulte nosso na referência[42].

Ao adicionar o termo  $k^2$  na Eq. (2.8), obtemos

$$H = A\sigma_x k_x + M\sigma_z \rightarrow H + M_w\sigma_w k_x^2, \quad (2.51)$$

$\sigma_w$  define o tipo de massa de Wilson. Se discretizarmos este novo  $H$  e novamente considerarmos  $\psi_j = \sum_n C_n e^{iq_n x}$ , encontramos a seguinte equação de autovalores

$$\sum_n C_n \left[ A \frac{\sin q_n \delta x}{\delta x} \sigma_x + \frac{2m\sigma_w}{\delta x^2} (1 - \cos(q_n \delta x)) + M\sigma_z - \epsilon \mathbb{I} \right] e^{iq_n x} = 0. \quad (2.52)$$

Em particular, se  $q_n = \pi/\delta x$  encontramos que

$$\epsilon \left( q_n = \frac{\pi}{\delta x} \right) = \pm \sqrt{\left[ \frac{4M_w}{\delta x^2} \right]^2 + m^2} \quad \text{se } m = 0 \rightarrow \epsilon = \pm \frac{4M_w}{\delta x^2}, \quad (2.53)$$

onde assumimos que  $\sigma_w$  tem autovalores  $\pm 1$ . A Eq. (2.53) nos informa que ao adicionarmos o termo quadrático, introduz-se um gap em  $q_n = \pi/\delta x$  que eliminam os férmions duplicados, deslocando-os para altas energias como ilustrado na Fig.9. Note que se supormos que as bordas do sistema estejam longe, i.e.  $x = \pm L \rightarrow \infty$ , a Eq. (2.52) retorna ao caso contínuo onde  $q_n \rightarrow k$ . No entanto, com a adição do termo quadrático não é necessário tomar este limite. Em nosso artigo[42], nós mostramos que a partir dos métodos dos invariantes<sup>6</sup> os termos quadráticos que definem a massa de Wilson surgem naturalmente no Hamiltoniano do sistema. Além disso, mostramos também que a matriz  $\sigma_w$  é sempre equivalente à matriz que define a condição de contorno do problema em questão.

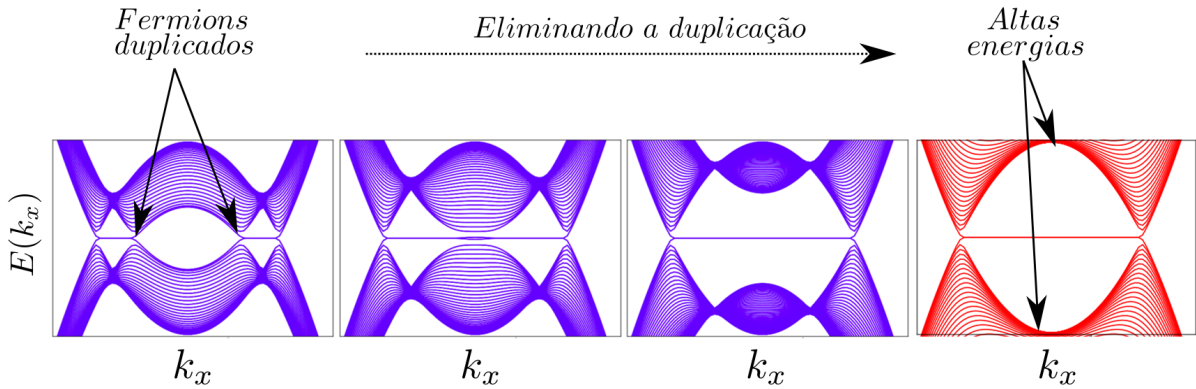


Figura 9 – Os resultados desta figura ilustram a remoção completa dos férmions duplicados após a adição do termo quadrático. A cada etapa foram escolhidos valores para  $M_w$  até que os férmions duplicados fossem deslocados para mais altas energias.

O raciocínio abordado até aqui foi utilizado para justificar a necessidade dos termos quadráticos presentes na Eq. (2.10) durante o processo da implementação numérica deste

<sup>6</sup> O método dos invariantes é uma técnica que permite determinar o Hamiltoniano de um sistema por meio de análises de simetria. Para aplicar esta técnica, é necessário que o sistema seja invariante sob a aplicação das simetrias consideradas. Para mais detalhes, ver Ref. [45]

trabalho. A seguir, abordaremos sobre os fenômenos físicos e as técnicas matemáticas que comumente estão envolvidos na compreensão da solução de transporte eletrônico em sistemas de tamanho finitos. Na sequência, mostro um exemplo utilizando a Eq. (2.9) para um caso unidimensional.

## 2.3 Breve teoria sobre transporte eletrônico

Ao longo desta seção, iremos abordar sobre o tipo de regime de transporte que foi considerado no desenvolvimento deste trabalho. Para isso, explico brevemente os conceitos que envolvem este regime e mais adiante, soluciono dois exemplos: o primeiro é sobre um sistema cuja estrutura de bandas é parabólica, o segundo sobre isolantes topológicos.

### 2.3.1 O regime balístico

O transporte eletrônico é fortemente influenciado pelo tamanho ( $L$ ) finito do sistema. Isso porque a relação entre o comprimento de onda eletrônico  $\lambda$  e este sistema geram fenômenos de interferência que influenciam diretamente na condução do elétron. Neste sentido, são estabelecidos diversos regimes em que esta condução pode ocorrer. Por exemplo, se o sistema for extremamente grande (em relação ao comprimento de onda eletrônico, i.e.  $L \gg \lambda$ ), podemos desconsiderar quaisquer efeitos quânticos e dizer que o sistema está num regime clássico. Porém, se o sistema for pequeno a ponto de quantizar o movimento eletrônico (i.e.  $\lambda \approx L$ ), surgem efeitos de interferência devido a natureza ondulatória do elétron e os efeitos devido as propriedades quânticas não podem ser descartadas. A parte desta separação entre quântico e clássico, ainda existem outras classificações que determinam o tipo de condução eletrônica em que o sistema está submetido, como por exemplo o regime balístico. No regime de transporte balístico, assume-se que o elétron viaja ao longo do sistema sem colidir com nenhuma impureza. Estas impurezas podem ser defeitos geométricos que são comumente encontradas num dispositivo semiconductor ou até vibrações da rede ou contatos magnéticos no sistema. Devido a estas imperfeições, os elétrons se espalham ao longo do dispositivo e distintos fenômenos de transporte são observados. Quando o elétron colide nestas imperfeições (a depender da impureza) a função de onda eletrônica é afetada de maneira distinta. Por exemplo, se após colidir o elétron muda sua direção de propagação mas permanece com sua energia, dizemos que a colisão é do tipo elástica. No entanto, quando tanto sua direção quanto sua energia muda em cada evento de colisão, dizemos que ocorreu uma colisão inelástica. Para cada uma destas situações, estabelecemos uma grandeza de escala para nos auxiliar na compreensão da dinâmica eletrônica. No caso de colisões elásticas, o caminho que o elétron percorre entre dois sucessivos eventos de colisão é chamado de livre caminho médio ( $l_0$ ). Seu valor é calculado pela expressão  $l_0 = \nu\tau$ , onde  $\nu$  é a velocidade média do elétron e  $\tau$  é o tempo de relaxação entre as colisões. Em colisões inelásticas, definimos o comprimento de espalhamento  $l_{in}$



e seu valor é calculado pela expressão  $l_{in} = \sqrt{D\tau_{in}}$ , onde  $D = \nu^2\tau/d$  é o coeficiente de difusão, e  $d$  é a dimensionalidade do sistema (i.e.  $d = 1, 2, 3$ ).

## 2.4 A matriz de espalhamento-S e de transferência-M

Nesta seção iremos discutir sobre um dos métodos matemáticos que descrevem a propagação de uma onda em sistemas eletrônicos. Os métodos são: a matriz de espalhamento e a matriz de transferência, mais conhecidas pelos nomes matriz- $S$  e matriz- $M$  respectivamente. A ordem com que faremos as análises desses métodos será a seguinte: Primeiro, trataremos o problema de espalhamento utilizando a matriz- $S$ . Essa matriz relaciona as amplitudes das ondas que entram na região de espalhamento com as que saem. Segundo, abordaremos sobre o mesmo problema sob a perspectiva da matriz- $M$ , pois diferentemente da matriz- $S$ , esta daqui relaciona as amplitudes das ondas do lado esquerdo da região espalhadora com as da direita. Para definir formalmente estas matrizes, primeiro solucionamos um caso trivial em que o sistema possui bandas parabólicas. Na sequência, solucionamos também um caso unidimensional envolvendo isolantes topológicos.

### 2.4.1 Sistema trivial parabólico

Inicialmente, suponha a propagação de uma onda num sistema bidimensional como ilustrado na Fig.10.

Agora, considere que este mesmo sistema está separado em três regiões, sendo estas: o eletrodo esquerdo  $L$ , a região do centro espalhador  $C$  e o eletrodo direito  $R$ . Os elétrons entram na região central por meio dos eletrodos  $L$  e  $R$  e podem ser refletidos ou transmitidos através da região  $C$ . A princípio, consideramos que essa região central tem dimensões  $0 < x < L$  e que a energia do elétron ao longo do sistema não muda (i.e.  $L \ll l_{in}$ ). Além disso, supomos que os elétrons confinados estão na região  $0 < y < W$  e que os eletrodos

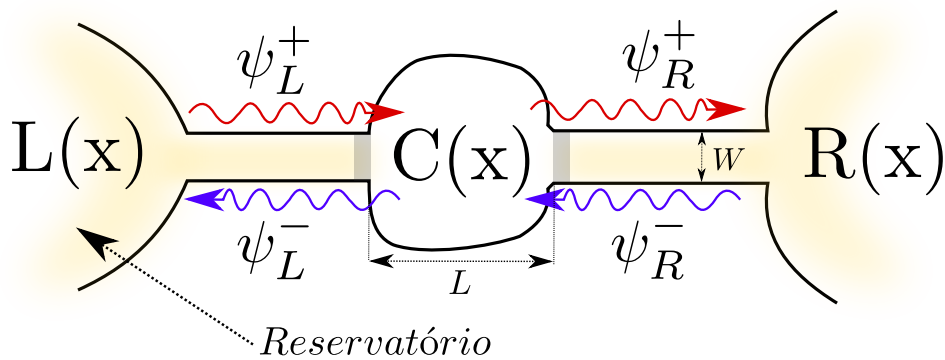


Figura 10 – Esquema de um sistema bidimensional em que elétrons fluem no interior de uma região espalhadora

possuem invariância translacional na direção- $x$ . O Hamiltoniano deste sistema é

$$H(x, y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} = H(x) + H(y). \quad (2.54)$$

Os autovalores e as autofunções que representam este sistema são respectivamente

$$\epsilon_n(k_x) = \epsilon_n^o + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad \text{onde} \quad \epsilon_n^o = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2, \quad (2.55)$$

e,

$$\psi(x, y) = A e^{ik_x x} \sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right) = \left[ \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}} \right] \left[ \frac{\sin(n\pi y/W)}{\sqrt{W/2}} \right]. \quad (2.56)$$

A Eq. (2.56) representa os autoestados presentes nos eletrodos conectados à amostra mesoscópica. Por meio desta equação, definimos os elétrons que entram entrando e saem da região  $C$  como:

$$\psi_L^\pm = A_L^\pm e^{\pm ik_x x} \phi_n(y) \quad \text{e} \quad \psi_R^\pm = A_R^\pm e^{\pm ik_x x} \phi_n(y). \quad (2.57)$$

O subscrito  $L$  representa as funções do eletrodo esquerdo, enquanto que  $R$  as do lado direito. As constantes  $A_L^\pm$  e  $A_R^\pm$  representam os coeficientes de incidência e transmissão (+) e de reflexão (-) (i.e. amplitudes) de suas respectivas funções de onda. Para uma dada energia  $\epsilon_n$ , devemos somar sobre todos possíveis estados que contribuem para que o transporte, i.e.,

$$\Psi(x, y) = \begin{cases} \sum_n \psi_{nL}^+ + \sum_n \psi_{nL}^-, & (\text{eletrodo L}) \\ \Psi_C, & (\text{centro espalhador C}) \\ \sum_n \psi_{nR}^+ + \sum_n \psi_{nR}^-, & (\text{eletrodo R}) \end{cases} \quad (2.58)$$

onde  $\Psi_C$  é a função de onda no interior do centro espalhador. Como  $H \propto k^2$ , a solução exige que  $\Psi(x, y)$  e  $\partial_x \Psi(x, y)$  seja contínua em todo o espaço. Portanto, na interface  $x = 0$  e  $x = L$  obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_n (\psi_{nL}^+ + \psi_{nL}^-) \Big|_{x=0^-} = \Psi_C \Big|_{x=0^+} \\ \sum_n (\psi_{nR}^+ + \psi_{nR}^-) \Big|_{x=L^+} = \Psi_C \Big|_{x=L^-} \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_n (\psi_{nL}^+ + \psi_{nL}^-)' \Big|_{x=0^-} = \Psi_C' \Big|_{x=0^+} \\ \sum_n (\psi_{nR}^+ + \psi_{nR}^-)' \Big|_{x=L^+} = \Psi_C' \Big|_{x=L^-}. \end{array} \right. \quad (2.59)$$

Aplicando as devidas condições de contorno e usando as propriedades de ortogonalidade, encontramos um sistema de equações que ilustram a dependência linear entre os coefi-

entes  $A_L^\pm$  e  $A_R^\pm$ ,

$$(A_{nL}^+ + A_{nL}^-) = \sqrt{k_n} \int dy \phi_n(y) \Psi_C(0, y) \quad (2.60)$$

$$(A_{nR}^+ e^{ik_n L} + A_{nR}^- e^{ik_n L}) = \sqrt{k_n} \int dy \phi_n(y) \Psi_C(L, y) \quad (2.61)$$

$$(A_{nL}^+ - A_{nL}^-) = \frac{-i}{\sqrt{k_n}} \int dy \phi_n(y) \partial_x \Psi_C(0, y) \quad (2.62)$$

$$(A_{nR}^+ e^{ik_n L} - A_{nR}^- e^{ik_n L}) = \frac{-i}{\sqrt{k_n}} \int dy \phi_n(y) \partial_x \Psi_C(L, y). \quad (2.63)$$

As Eqs.(2.60)-(2.60) permitem calcular o valor exato para função de onda  $\Psi_C$ . No entanto, fazer este cálculo é cansativo e desnecessário. A primeira maneira (alternativa) de representar essa linearidade é por meio da matriz  $S$ ,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \psi_L^-(x=0) \\ \psi_R^+(x=L) \end{pmatrix}}_{\text{saída}} = S \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_L^+(x=0) \\ \psi_R^-(x=L) \end{pmatrix}}_{\text{entrada}}, \quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

Para uma dada energia  $\epsilon_n$ , os elementos da matriz  $S$  representam as propriedades de espalhamento das ondas que entram e saem do centro espalhador. Por exemplo, o elemento  $S_{11}$  é a amplitude da  $n$ -ésima onda  $\Psi_n$  que é refletida de volta para o eletrodo  $L$ . O  $S_{21}$  é a onda que se propaga a partir do eletrodo  $L$  para o centro espalhador  $C$ . Já os elementos  $S_{12}$  e  $S_{22}$  são, respectivamente, a reflexão e a transmissão dos elétrons quando analisamos o sistema na partir do eletrodo  $R$ .

A segunda maneira é por meio da matriz de transferência,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \psi_R^+(x=L) \\ \psi_R^-(x=L) \end{pmatrix}}_{\text{direita}} = M \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_L^+(x=0) \\ \psi_L^-(x=0) \end{pmatrix}}_{\text{esquerda}}, \quad M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

em que  $M$  representa a matriz de transferência. A menos de uma reorganização, a interpretação para os valores dos coeficientes  $S_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ) da matriz  $S$  valem para os coeficientes  $M_{ij}$  da matriz  $M$ . A relação entre os elementos de  $M$  e  $S$  é dada por

$$M = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}} & S_{22}/S_{12} \\ -S_{11}/S_{12} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S = \begin{pmatrix} -M_{11}/M_{12} & \frac{1}{M_{12}} \\ M_{21} - \frac{M_{22}M_{11}}{M_{12}} & M_{22}/M_{12} \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

É importante ressaltar que essas duas matrizes ( $S$  e  $M$ ), na verdade, são de dimensões  $2N \times 2N$ , em que  $N \times N$  é o bloco que relaciona a reflexão e a transmissão da onda propagante a partir de um determinado eletrodo. Mas como em geral, nestes tipos de sistemas existe a simetria de reversão temporal e conservação de corrente, basta nos restringirmos a analisar somente um único bloco  $2 \times 2$  desta matriz. Além disso, em

termos de  $A_L^\pm$  e  $A_R^\pm$  a Eq. (2.64) fica

$$\begin{pmatrix} A_L^- \\ A_R^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_R^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} A_L^- = S_{11}A_L^+ + S_{12}A_R^- \\ A_R^+ = S_{21}A_L^+ + S_{22}A_R^- \end{cases}, \quad (2.67)$$

enquanto que a Eq.(2.65),

$$\begin{pmatrix} A_R^+ \\ A_R^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \end{pmatrix} \rightarrow \begin{cases} A_R^+ = M_{11}A_L^- + M_{12}A_R^+ \\ A_R^- = M_{21}A_L^- + M_{22}A_R^+ \end{cases}. \quad (2.68)$$

## 2.4.2 Operador densidade corrente

Para que a derivação do operador corrente seja a mais geral possível, vamos considerar o Hamiltoniano<sup>7</sup>

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}). \quad (2.69)$$

Segundo a equação da continuidade, a densidade de corrente é escrita como

$$\nabla j(\mathbf{r}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = -e \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (2.70)$$

sendo  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi(r, t)\psi^\dagger(r, t)$  a densidade de probabilidade da função de onda obtida através da equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\psi}(r, t) = H\psi(r, t), \\ i\hbar\dot{\psi}^\dagger(r, t) = -\psi^\dagger(r, t)H^\dagger. \end{cases} \quad (2.71)$$

Reescrevendo a Eq. (2.70) em termos da Eq. (2.71), encontramos

$$\nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{e}{i\hbar} \left[ (H^\dagger \psi^\dagger) \psi - \psi^\dagger (H \psi) \right]. \quad (2.72)$$

Por simplicidade, considere a substituição  $\mathbf{\Pi} \rightarrow \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}$ , em que  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ . Dessa maneira  $\mathbf{\Pi} = -i\hbar(\nabla - i\alpha)$  e  $\mathbf{\Pi}^\dagger = +i\hbar(\nabla + i\alpha)$ , sendo  $\alpha = \frac{e}{c\hbar}\mathbf{A}$ . Assim, reescrevemos a Eq.(2.72) como

$$\nabla j(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{2mi} \left[ \psi^\dagger (\nabla^2 \psi) - (\nabla^2 \psi^\dagger) \psi \right] = \nabla \left\{ \frac{e\hbar}{2mi} \left[ \psi^\dagger (\nabla \psi) - (\nabla \psi^\dagger) \psi \right] \right\}. \quad (2.73)$$

Integrando ambos os lados desta equação obtemos,

$$j(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2m} \left[ \psi^\dagger (\mathbf{p}\psi) - (\mathbf{p}\psi^\dagger) \psi \right]. \quad (2.74)$$

Para calcular a densidade de corrente  $j(x)$  para o caso da Eq. (2.54), basta aplicar a função de onda  $\psi_{L,R}^\pm$  da Eq. (2.57) na Eq. (2.74) Feito isto, encontramos

$$j_n(x) = \pm \frac{e\hbar}{m} |A_{L,R}^\pm|^2 k_x(\epsilon_n), \quad k_x(\epsilon_n) = \sqrt{\frac{2m(\epsilon_n - \epsilon_n^o)}{\hbar^2}}, \quad (2.75)$$

sendo  $\epsilon_n$ , a energia definida na Eq. (2.55).

<sup>7</sup> Este Hamiltoniano foi primeiramente introduzido durante a discussão do efeito Hall quântico no capítulo 1 e sua derivação está discutida no apêndiceB

### 2.4.2.1 Operador corrente para Hamiltonianos tipo Dirac

Retornando a discussão para Hamiltonianos tipo Dirac, i.e,

$$H = -iv\alpha\hbar\nabla + m\beta + \left(B\hbar^2\nabla^2\right)\beta, \quad (2.76)$$

o operador  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  é obtido de maneira análoga ao caso anterior. Vale lembrar que as matrizes  $\alpha$  e  $\beta$  são matrizes de Dirac  $4 \times 4$  definidas no início da seção 2.1. Ao calcular o complexo conjugado da Eq. (2.76) e substituir na Eq. (2.72), o termo  $\nabla\mathbf{j}(\mathbf{r})$  torna-se

$$\nabla\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \left[\psi^\dagger\alpha \cdot (\nabla\psi) + (\nabla\psi^\dagger) \cdot \psi\right]ev - \left[\psi^\dagger(\nabla^2\beta\psi) + (\nabla^2\beta\psi)^\dagger\psi\right]\frac{eB\hbar^2}{i\hbar} \quad (2.77)$$

$$= \nabla \cdot \left[\psi^\dagger\alpha\psi\right]ev + \nabla \cdot \left[\psi^\dagger(p\beta\psi) + (p\beta\psi)^\dagger\psi\right]eB. \quad (2.78)$$

Ao integrar esta equação, encontramos a expressão de  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ ,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \underbrace{ev\left[\psi^\dagger\alpha\psi\right]}_{\text{linear}} + eB\underbrace{\left[\psi^\dagger(p\beta\psi) + (p\beta\psi)^\dagger\psi\right]}_{\text{quadrático}}. \quad (2.79)$$

Note que o segundo termo da Eq (2.79) deve-se ao Hamiltoniano ser quadrático em  $k$ , caso  $B = 0$ , a operador densidade de corrente torna-se

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = ev\left[\psi^\dagger\alpha\psi\right]. \quad (2.80)$$

### 2.4.3 Lei da conservação de carga, simetria de reversão temporal

O sistema estudado na seção 2.4.1, não troca partículas com nenhum meio externo. Isto significa que o número total de partículas que entram e saem da região central  $C$  (ilustrado na Fig. 10) pelos eletrodos  $L$  e  $R$ , são o mesmo. Assim, podemos afirmar que o sistema possui conservação de carga e que a densidade de corrente em  $x = 0$  deve ser a mesma que em  $x = L$ , ou seja,

$$j(x = 0) = j(x = L). \quad (2.81)$$

Por meio desta informação, é possível reescrever  $j$  em termos de  $\psi_{L,R}^\pm$  usando a Eq. (2.74) para obtermos

$$|\psi_L^+|^2 - |\psi_L^-|^2 = |\psi_R^+|^2 - |\psi_R^-|^2 \rightarrow \left(\psi_L^{+*}\psi_R^*\right) \begin{pmatrix} \psi_L^{+*} \\ \psi_R^- \end{pmatrix} = \left(\psi_R^{+*}\psi_L^*\right) \begin{pmatrix} \psi_R^{+*} \\ \psi_L^- \end{pmatrix}. \quad (2.82)$$

Ao comparar a expressão da Eq. (2.82) com a Eq.(2.64), reescrevemos esta equação em termos da matriz  $S$  como sendo

$$\left(\psi_L^{+*}\psi_R^*\right) \left(S^\dagger S\right) \begin{pmatrix} \psi_L^{+*} \\ \psi_R^- \end{pmatrix} = \left(\psi_R^{+*}\psi_L^*\right) \begin{pmatrix} \psi_R^{+*} \\ \psi_L^- \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

Note que, para justificar esta igualdade, é necessário que

$$S^\dagger S = \mathbb{1}. \quad (2.84)$$

Reescrevendo a relação encontrada na Eq. (2.84) por meio dos elementos de matriz  $S_{ij}$  da Eq. (2.64), em que  $r = |S_{11}|$ ,  $t = |S_{21}|$ ,  $t' = |S_{12}|$  e  $r' = |S_{22}|$ , obtemos

$$\begin{cases} r^\dagger r + t^\dagger t = 1 \\ r^\dagger t' + t^\dagger r' = 0. \end{cases} \quad (2.85)$$

Aqui,  $r$  significa *coeficiente de reflexão* e  $t$  o *coeficiente de transmissão* do eletrodo  $L$ . Os termos com o sobrescrito ( $'$ ) referem-se aos coeficientes das ondas em relação ao eletrodo  $R$ .

Como o Hamiltoniano  $H(x, y)$  apresenta simetria de reversão temporal, podemos reconstruir toda a teoria da matriz  $S$  discutida até aqui, solucionando<sup>8</sup>  $H^*(x, y)\psi^* = \epsilon\psi^*$ . Ao fazer isto, encontramos

$$SS^\dagger = \mathbb{1}, \quad (2.86)$$

e portanto,

$$\begin{cases} r'^\dagger r' + t'^\dagger t' = 1 \\ t'^\dagger r + r'^\dagger t = 0. \end{cases} \quad (2.87)$$

Ao comparar as Eqs. (2.84) e (2.86), concluímos que  $S$  é uma matriz unitária e consequentemente  $\det[S] = 1$ . Além disso, também verificamos que  $r = |S_{11}| = |S_{22}| = r'$  e  $t = |S_{21}| = |S_{12}| = t'$ . Vale ressaltar que se existir quebra de simetria de reversão temporal (como no caso do Hamiltoniano da Eq. (2.69)) a matriz  $S$ , além de ser unitária, também é simétrica[46].

#### 2.4.4 Cálculo da corrente, fórmula de Landauer

Nesta seção, o objetivo é calcular a fórmula de Landauer para a condutância, por meio dos conceitos envolvendo a matriz  $S$  e o exemplo da seção 2.4.1. Para isso, vamos calcular a corrente eletrônica que flui entre os reservatórios (terminais)  $L$  e  $R$  ilustrado na Fig. 10. Os elétrons desse reservatório são invariantes translacionais em  $\hat{x}$ , possuem estados estacionários e não apresentam flutuações de energia[47]. Sendo assim, assumimos que tais elétrons respeitam a função de distribuição de Fermi e que a corrente que será injetada no sistema, está igualmente distribuída ao longo do eletrodo.

A distribuição de Fermi é representada pela função:

$$f(\epsilon(k), \epsilon_f) = \frac{1}{e^{(\epsilon(k) - \epsilon_f)/k_B T} + 1}, \quad (2.88)$$

<sup>8</sup> Uma vez que a simetria de reversão temporal exige que  $H = H^*$ , se  $\psi$  é solução de  $H$ ,  $\psi^*$  também é.

sendo que  $M$  é a temperatura do sistema e  $\epsilon_f$  é a energia de Fermi. Em  $T = 0K$ ,  $f(\epsilon, \epsilon_f) = 1 - \Theta(\epsilon_f - \epsilon(k))$ , onde  $\Theta$  é a função degrau. Em outras palavras,  $f = 1$  para  $\epsilon_f > \epsilon(k)$  e  $f = 0$  para  $\epsilon_f < \epsilon(k)$ .

A Eq. (2.88) informa como os elétrons do reservatório  $L$  e  $R$  ocupam os níveis de energia (Eq.(2.55)) daquele sistema. Estes níveis representam estados eletrônicos em que os elétrons distribuem-se segundo o princípio de exclusão de Pauli<sup>9</sup>. Sob certas condições de equilíbrio do sistema, a ocupação destes estados começa do nível mais baixo e segue até o mais o alto, até que todos os estados sejam preenchidos. Se um nível de energia  $n$  está preenchido, o número de elétrons contido neste estado será

$$\sum_k f(\epsilon_n(k), \epsilon_f) = N. \quad (2.89)$$

Com esta consideração, se alguma voltagem  $\phi$  (também conhecido como potencial químico) for aplicada aos eletrodos  $L$  e  $R$ , o nível de energia  $\epsilon$  dos elétrons em cada terminal torna-se  $\epsilon \pm e\phi_{L|R}$  e conseqüentemente,

$$f_L(\epsilon, e\phi_L) = f_L(\epsilon + e\phi_L), \quad \text{e} \quad f_R(\epsilon, e\phi_R) = f_R(\epsilon - e\phi_L). \quad (2.90)$$

Para potenciais suficientemente pequenos, i.e.  $\phi_{L|R} \approx 0$ , podemos utilizar a expansão de Taylor na Eq.(2.90) e reescrever  $f_{L|R}$  como

$$f_{L|R} = f_{L|R}(\epsilon \pm \phi_{L|R}) \approx f_{L|R}(\epsilon) \pm e \frac{\partial f_F}{\partial \epsilon} \phi_{L|R}. \quad (2.91)$$

Para obter a expressão da corrente  $I$  que atravessa este sistema, devemos calcular,

$$I(x) = \int_0^L j(x) dx = -\frac{e\hbar}{2mi} \int_0^L \left( \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x} \psi \right) dx. \quad (2.92)$$

Para realizar este cálculo de maneira simples, suponha a propagação de um único estado eletrônico (de energia  $\epsilon$  e vetor de onda  $k_x$ ) devido somente ao eletrodo  $L$ . Sob esta consideração, a função de onda que descreve esta situação é

$$\psi(x \in L) = \sum_n \left( \psi_{nL}^+ + \psi_{nL}^- \right) \equiv A_L^+ \frac{e^{+ik_x x}}{\sqrt{L}} + A_L^- \frac{e^{-ik_x x}}{\sqrt{L}} \quad (2.93)$$

sendo  $A_L^+$  e  $A_L^-$  as amplitudes das funções de onda que entram e saem do eletrodo  $L$  para a região  $C$  respectivamente. Ao calcular o operador  $j(x)$  utilizando as funções de onda da Eq. (2.93) temos,

$$j_L(x) = \frac{e\hbar}{mL} \left( |A_L^+|^2 - |A_L^-|^2 \right) k_x. \quad (2.94)$$

<sup>9</sup> Este princípio afirma que elétrons idênticos não podem ocupar o mesmo estado de energia simultaneamente. Como os elétrons possuem spin, cada estado pode ser ocupado por dois elétrons com orientação de spin opostas.

Retornando a Eq. (2.67) e usando as definições  $r = |S_{11}|$ ,  $t = |S_{21}|$ ,  $t' = |S_{12}|$  e  $r' = |S_{22}|$ , reescrevemos o termo  $|A_L^-|^2$  como,

$$|A_L^-|^2 = |rA_L^+ + t'A_L^-|^2 \quad (2.95)$$

$$= A_L^{+\dagger}(r^\dagger r)A_L^+ A_R^{-\dagger}(t'^\dagger t)A_R^- + 2Re\left\{A_L^{+\dagger}(r^\dagger t')A_R^-\right\}. \quad (2.96)$$

Como estamos interessados em calcular a corrente devido somente as contribuições do eletrodo  $L$ , dizemos que  $A_R^\pm \rightarrow 0$  e então  $|A_L^-|^2 = A_L^{+\dagger}(r^\dagger r)A_L^+$ . Assim, substituindo esta expressão na Eq. (2.94), temos

$$j_L(x) = \frac{e\hbar}{mL} (1 - r^\dagger r)k_x = \frac{e\hbar}{mL} (t'^\dagger t)k_x = \frac{e\hbar}{mL} (T)k_x, \quad (2.97)$$

sendo o módulo da amplitude  $|A_L^\pm|^2 = 1$  e  $T = t'^\dagger t$  o produto entre os coeficientes de transmissão  $t'$  e  $t$ . Devido a lei de conservação, a densidade de corrente  $j_R(x)$  no eletrodo direito é igual a  $j_L(x)$ . No entanto, muda-se o sentido do fluxo da corrente e portanto  $j_R(x) = -j_L(x)$ . Agora, para obter a corrente total  $I(x)$  devido a contribuição de todos os estados  $\psi_n$  propagantes, devemos somar sobre todos os possíveis  $k_x$  que fazem com que o transporte eletrônico ocorra. Além disso, como os estados propagantes estão ligados com a equação distribuição de Fermi, também devemos considerá-la no cálculo. Se estes estados tem energia  $\epsilon$  tal que em cada eletrodo  $L$  e  $R$   $\epsilon \rightarrow \epsilon \pm e\phi_{L|R}$ , a corrente total fica,

$$I = \sum_n \sum_{k_x > 0} j_n(x) \left( f_L(\epsilon + e\phi_R) - f_R(\epsilon - e\phi_R) \right), \quad (2.98)$$

sendo  $f_{L|R}$  a função da Eq. (2.88). O termo da soma em  $k_x$  fica

$$\sum_{k_x > 0} \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk_x = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_0^{+\infty} \frac{d\epsilon}{v(\epsilon)}, \quad v(\epsilon) = \frac{\hbar k_x(\epsilon)}{m}. \quad (2.99)$$

Utilizando a Eq. (2.91) e substituindo a (2.99) na Eq. (2.98), encontramos

$$I = \sum_n \frac{L}{2\pi\hbar} \int_0^{+\infty} \frac{d\epsilon}{v(\epsilon)} \frac{e\hbar}{mL} M_n(\epsilon) \left( \frac{\partial f_L}{\partial \epsilon} e\phi_L - \frac{\partial f_R}{\partial \epsilon} e\phi_R \right). \quad (2.100)$$

O resultado da Eq. (2.98) considera valores de temperatura diferente de zero para a função de distribuição de Fermi. Quando esta temperatura é zero, a derivada desta distribuição, é a função delta. Assim, a Eq. (2.98) torna-se

$$I = \frac{e^2}{h} \sum_n \int_0^{+\infty} M_n(\epsilon) \left( \frac{\partial f_F}{\partial \epsilon} \right) (\phi_L - \phi_R) d\epsilon \quad (2.101)$$

$$= \frac{e^2}{h} \sum_n \int_0^{+\infty} M_n(\epsilon) \delta(\epsilon \pm e\phi) (\phi_L - \phi_R) d\epsilon \quad (2.102)$$

$$= \frac{e^2}{h} \sum_n M_n(\epsilon) (\phi_L - \phi_R) = GV \quad (2.103)$$



sendo  $V = (\phi_L - \phi_R)$  a diferença de potencial, e  $G$  a fórmula de Landauer para a condutância entre os terminais  $L$  e  $R$ ,

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_n M_n(\epsilon). \quad (2.104)$$

## 2.5 Simulações e exemplos com Hamiltonianos tipo Dirac

### 2.5.1 Cálculo do coeficiente de transmissão para um sistema unidimensional

Na seção anterior apresentamos diversos modelos envolvendo Hamiltonianos tipo Dirac lineares e quadráticos em  $k$ . Obtivemos expressões gerais que nos permitem calcular o comprimento de penetração da função de onda destes tipos de sistema, o coeficiente de transmissão, a densidade de corrente e a condutância através de um sistema uni- e bidimensional.

Nesta seção, enfatizamos estes conceitos discutidos anteriormente calculando o coeficiente transmissão para o Hamiltoniano

$$H = A\sigma_x k_x + M\sigma_z. \quad (2.105)$$

Note que a equação deste Hamiltoniano é diferente da Eq. (2.11) estudado na seção 2.1.1.1. Aqui, consideramos que o termo que multiplica  $k_x$  é  $\sigma_x$ , ao invés de  $\sigma_y$ .

Para calcular o coeficiente de transmissão, supomos que nosso sistema apresente três regiões, sendo estas:  $L$  (o eletrodo esquerdo),  $C$  (a região central) e  $R$  (o eletrodo direito). Para este caso em particular, consideramos que os eletrodos  $L$  e  $R$ , são descritos pelo Hamiltoniano da Eq (2.105) com o termo massivo  $M = 0$ . Ou seja, a relação de dispersão dos elétrons dos reservatório  $L$  e  $R$  não possuem gap em sua estrutura. Entretanto, a região  $C$  possui um valor finito  $M$  que induz a abertura de um gap em sua estrutura de banda (mais a frente discutimos como este  $M$  é determinado). A situação apresentada aqui, está esquematizada na Fig.11. Como a maior parte dos cálculos para determinar a função de onda tipo de Hamiltoniano foi obtida na seção 2.1.1, podemos simplesmente afirmar que autoenergia para este sistema é

$$\epsilon(k_x) = \sqrt{A^2 k_x^2 + M^2}, \quad (2.106)$$

que em termos  $k_x$  fica escrito como,

$$k_x(\epsilon) = \frac{\pm \sqrt{(\epsilon + M)(\epsilon - M)}}{A}. \quad (2.107)$$

A função de onda  $\psi(x)$  também já foi obtida anteriormente na seção 2.1.1. Aqui, precisamos da representação matricial de  $\psi(x)$  para descrever cada uma das regiões. De forma geral,  $\psi(x)$  é

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} e^{ik(\epsilon)x} & e^{-ik(\epsilon)x} \\ f(\epsilon)e^{ik(\epsilon)x} & -f(\epsilon)e^{-ik(\epsilon)x} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = C(x) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad f(\epsilon) = \sqrt{\frac{\epsilon + M}{\epsilon - M}}. \quad (2.108)$$

Note que esta equação geral já leva em consideração que  $M \neq 0$ . Portanto, podemos dizer que esta equação de  $\psi(x)$  descreve a função de onda na região  $C$  do nosso sistema. Como  $M = 0$  nas regiões  $L$  e  $R$ ,  $f(\epsilon) = 1$ . Assim, funções de onda para estas regiões são

$$\Psi_L^\pm(x) = \begin{bmatrix} e^{ik(\epsilon)x} & e^{-ik(\epsilon)x} \\ e^{ik(\epsilon)x} & -e^{-ik(\epsilon)x} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} = L(x) \begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} \quad \text{e}, \quad (2.109)$$

$$\Psi_R^\pm(x) = \begin{bmatrix} e^{ik(\epsilon)x} & e^{-ik(\epsilon)x} \\ e^{ik(\epsilon)x} & -e^{-ik(\epsilon)x} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix} = R(x) \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix}. \quad (2.110)$$

sendo as constantes  $i$  e  $t$ , os coeficientes das ondas incidentes e transmitidas, enquanto que  $r$  e  $z$  os coeficientes das ondas que são refletidas. Para calcular a transmissão através deste sistema, devemos usar parte da Eq.(2.59) e calcular somente continuidade da funções de onda,

$$\psi_L(x=0) = \psi_C(x=0), \quad \psi_C(x=L) = \psi_R(x=L). \quad (2.111)$$

Como o Hamiltoniano da Eq. (2.105) é linear em  $k$ , não é necessário calcular a continuidade da derivada[42]. Das relações da Eq. (2.111) temos,

$$L(x=0) \begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} = C(x=0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} = L^{-1}(x=0)C(x=0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (2.112)$$

$$C(x=L) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = R(x=L) \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = C^{-1}(x=L)R(x=L) \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix} \quad (2.113)$$

Assim, reescrevendo toda esta expressão em termos dos coeficientes  $i$  e  $t$  encontramos,

$$\begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} = \left[ L^{-1}(x=0)C(x=0)C^{-1}(x=L)R(x=L) \right] \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix}. \quad (2.114)$$

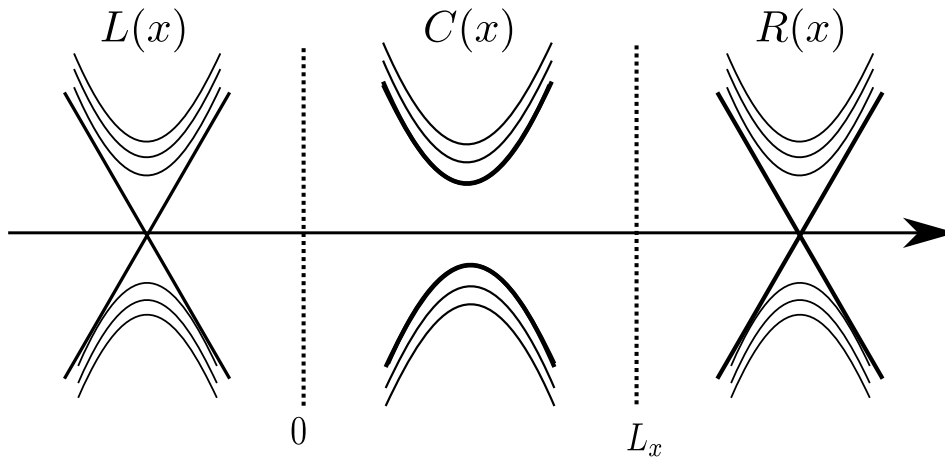


Figura 11 – Sistema unidimensional formado por três regiões:  $L(x)$ ,  $C(x)$ ,  $R(x)$ . As regiões  $L(x)$  e  $R(x)$  não possuem gap e portanto  $M = 0$ . A região  $C(x)$  possui gap, logo  $M \neq 0$ . A constante  $L_x$  define o tamanho do sistema estudado. Os elétrons irão se propagar da região  $L(x)$  até a  $R(x)$ .

O termo entre colchetes [...] representa a matriz de transmissão  $M$  como o da Eq. (2.65), ou seja,

$$T = L^{-1}(x=0)C(x=0)C^{-1}(x=L)R(x=L) \quad (2.115)$$

e assim,

$$\begin{pmatrix} i \\ r \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} t \\ z \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} i = M_{11}t + M_{12}z \\ r = M_{21}t + M_{22}z. \end{cases} \quad (2.116)$$

Para o caso particular estudado aqui, supomos que o coeficiente de incidência do elétron da região  $L$  é  $i = 1$  e o coeficiente de reflexão na região  $R$  é  $z = 0$ . Assim, encontramos que  $t = 1/M_{11}$  e portanto

$$t(\varepsilon) = \frac{2(\varepsilon^2 - \Delta^2)}{2\varepsilon^2 - \Delta^2(1 + \cos(\theta))}, \quad (2.117)$$

with  $\theta = (2L_c/\alpha)\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}$ . Para um caso geral em que existam diversas interfaces entre os eletrodos da esquerda  $L$  e o eletrodo da direita  $R$  é necessário aplicar a condição de continuidade quantas vezes forem necessário. Para tanto, basta fazer  $\psi(x_i) = \psi(x_{i+1})$ , sendo  $x_i$  a posição da  $i$ -ésima interface, onde  $i = 1, 2, 3 \dots N$ . Feito isto, a equação matricial para a transmissão descrita na Eq. (2.115) torna-se

$$T = L^{-1}(x) \left( \prod_{i=1}^{N-1} C_i(x_{i-1})C_i^{-1}(x_i) \right) R(x), \quad (2.118)$$

onde  $L(x)$ ,  $R(x)$  são matrizes como aquelas definidas na Eq. (2.110) e  $C_i(x_i)$  é a matriz que representa o centro espalhador na posição  $x_i$ .

O gráfico da Fig.12 ilustra o resultado da Eq. (2.117) para o sistema da Fig.11. Os parâmetros utilizados para calcular esta transmissão foram  $A = \hbar v \approx 318$  [meV nm], sendo a velocidade de fermi  $v \approx 483$  [nm/ps], e o termo massivo  $M \approx 16$  [meV]. O comprimento de penetração da função de onda para este caso é

$$l_k = A/M \approx 20.0nm. \quad (2.119)$$

Note que não há picos na transmissão quando este comprimento de penetração é maior ou igual ao tamanho  $L_x$  do sistema. Ou seja, quando  $l_k \geq L_x$  os autoestados de ambos os reservatórios  $L(x)$  e  $R(x)$  se enxergam e facilitam a transmissão de uma região para a outra. No entanto, observe na Fig.12(a) que a medida com que o tamanho do sistema aumenta, apenas alguns estados são transmitidos. Essa transmissão é caracterizada por picos. Esse fato é facilmente observado na Fig.12(b), quando  $l_k \ll L_x$ .

Os valores para as constantes  $A$ ,  $v$  e  $M$  foram extraídos baseando-se no Hamiltoniano do modelo BHZ bidimensional que discutiremos com mais detalhes no próximo capítulo desta dissertação. Em poucas palavras, este modelo estuda o transporte eletrônico em isolantes topológicos com constrições geométricas. Devido a esta constrição, surge um gap na região central do centro espalhador deste sistema. O valor deste gap é o valor do parâmetro  $M$  que utilizamos neste exemplo. Além disso, a constante  $v$ , foi obtida calculando-se  $v = (1/\hbar)\partial\varepsilon/\partial k_x$  para os autoestados no interior desta constrição.

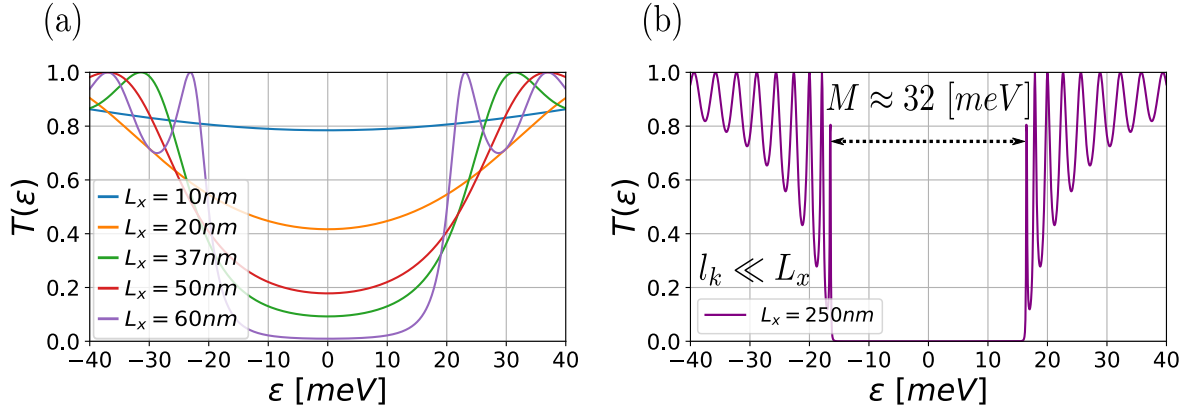


Figura 12 – Gráfico da transmissão entre os terminais  $L(x)$  e  $R(x)$  para diversos tamanhos  $L_x$  do sistema. As cores neste gráfico indicam os diferentes  $L_x$ . (a) Para valores do comprimento de penetração  $l_k > L_x$ , o sistema apresenta condutância finita na região do gap, mas não apresenta picos de ressonância neste intervalo de energia. Para  $L_x > l_k$ , os picos de transmissão ressonante fora do gap ficam mais evidentes. (b) Neste caso, o  $l_k$  é muito menor que  $L_x$  e somente os estados com energia ressonante são transmitidos para a região  $R(x)$ .

## 2.6 Simulações via Kwant

Kwant é um pacote python de código fonte aberto que permite calcular propriedades de transporte de sistemas quânticos de qualquer dimensão e geometria. Este pacote utiliza funções de Green recursivas e solucionam problemas de espalhamento via matriz-S para qualquer sistema de interesse[48]. Uma vez que o usuário informa ao Kwant o Hamiltoniano, a rede de Bravais, a geometria do centro espalhador, e a geometria dos eletrodos, é possível extrair as propriedades físicas do sistema de interesse utilizando comandos simples. Devido a esta facilidade, dedico a seção a seguir para mostrar brevemente como discretizar o Hamiltoniano do modelo BHZ e como informá-lo ao kwant.

### 2.6.1 Hamiltoniano BHZ discretizado

O Hamiltoniano que estamos interessados em discretizar é o do modelo BHZ. Para discretizá-lo, iremos utilizar o método das diferenças finitas e separar os termos de energia que vão compor o código no kwant. Estes termos que devemos encontrar são: a energia do sítio local ( $E_{onsite}$ ) e a energia de salto entre os sítios ( $E_{hopping}$ ). O sítio é definido pela coordenada  $\{i, j\}$  sendo  $(i, j = 1, 2, 3..)$ . A Fig 13 ilustra (de maneira pictórica) o significado destas energias. Por simplicidade, vamos escrever este Hamiltoniano como

$$H = (C - D\mathbf{k}^2)\sigma_0 + sAk_x\sigma_x + Ak_y\sigma_y + (M - B\mathbf{k}^2)\sigma_z, \quad (2.120)$$

em que  $\sigma_0 = \mathbf{1}_{2 \times 2}$ ,  $s = 1$  representa o bloco de spin-up e  $s = -1$  o bloco de spin-down. Por meio da técnica de diferenças finitas (introduzida na seção 2.2.1) reescrevemos os

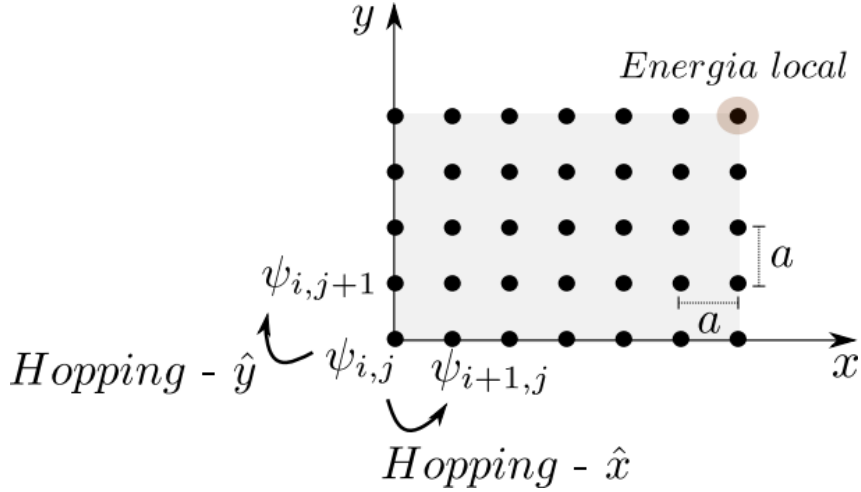


Figura 13 – Representação do processo de discretização do Hamiltoniano do modelo BHZ em uma rede quadrada de largura  $\delta_x = \delta_y = a$ . Nesta figura ilustramos os significados de energia do sítio local e a energia de salto entre os sítios

operadores derivadas de primeira ordem  $k_x = -i\partial_x$  e  $k_y = -i\partial_y$  como

$$k_x = -i\frac{f_{m+1} - f_{m-1}}{2\delta_x}, \quad k_y = -i\frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{2\delta_y} \quad (2.121)$$

e operadores derivadas de segunda ordem<sup>10</sup>  $k_x^2 = -\partial_x^2$  e  $k_y^2 = -\partial_y^2$  como

$$k_x^2 = \frac{f_{m+1} - 2f_m + f_{m-1}}{\delta_x^2}, \quad k_y^2 = \frac{f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}}{\delta_y^2}. \quad (2.122)$$

Assim, ao reescrever o momento  $k$  da Eq. 2.120 em termos das Eqs. 2.121 e 2.122 obtemos,

$$H = H_0 + H_x + H_y \quad (2.123)$$

sendo,

$$H_0 = (C\sigma_0 + M\sigma_z), \quad (2.124)$$

$$H_x = \left[ \frac{-isA}{2\delta_x} \left( \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{\delta_x} \right) + (B + D) \left( \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\delta_x^2} \right) \right] \quad (2.125)$$

$$H_y = \left[ \frac{-iA}{2\delta_y} \left( \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{\delta_y} \right) + (B + D) \left( \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{\delta_y^2} \right) \right]. \quad (2.126)$$

Para encontrarmos a equação que expressa  $E_{on-site}$  basta isolar os termos  $f_i$  e  $f_j$  das equações  $H_x$  e  $H_y$  e somá-las ao termo de energia  $H_0$ . Em contra partida, a energia  $E_{hopping}$  é determinado somente isolando os termos que multiplicam  $f_{i\pm 1,j}$  e  $f_{i,j\pm 1}$ . Nestas funções, o sinal (+) significa que o hopping em  $x$  ocorre da esquerda pra direita e o hopping em  $y$  de baixo para cima (como ilustra a Fig. 13). O sinal (-) indica o contrário. Para determinar a energia  $E_{hopping}$ , o kwant permite escolher uma única direção para a

<sup>10</sup> Para encontrar a representação discreta derivada de segunda ordem, basta somar as equações da Eq. (2.42).

função  $f$  para cada coordenada  $x$  e  $y$ . Por exemplo, podemos escolher  $f_{i-1}$  para hopping na direção  $x$  e  $f_{j-1}$  para o hopping na direção  $y$ , ou vice versa. Sendo assim, as equações que determinam  $E_{onsite}$  e  $E_{hopping}$  são:

$$E_{onsite} = C\sigma_0 + M\sigma_z - 4\left[\frac{D\sigma_0 + B\sigma_z}{a^2}\right] \quad (2.127)$$

$$E_{hopping-x} = \frac{D\sigma_0 + B\sigma_z}{a^2} - \frac{isA\sigma_y}{2a} \quad (2.128)$$

$$E_{hopping-y} = \frac{D\sigma_0 + B\sigma_z}{a^2} - \frac{iA\sigma_y}{2a} \quad (2.129)$$

onde consideramos que  $\delta_x = \delta_y = a$ . Após fazer a discretização e definir as energias de  $E_{hopping-x}$ ,  $E_{hopping-y}$  e  $E_{onsite}$  basta definir a geometria do sistema desejado. Para esta etapa, devemos escolher a função que melhor represente o sistema desejado. No nosso caso, a função é

$$F(x) = \frac{2 + \tanh(x_1) + \tanh(x_2)}{2}, \quad (2.130)$$

sendo  $x_1 = (x-C)/l_2$  e  $x_2 = (x+C)/l_2$ , em que  $l_2$  é a constante utilizada para determinar a suavidade da curva  $F(x)$ . Como o objetivo desta seção é abordar parte de como código deste trabalho foi implementado, sugerimos ao leitor que para mais detalhes consulte a Ref.[48]. A maneira com que o kwant assimila os resultados encontrados acima, bem como o código utilizado neste trabalho, estão anexados no Apêndice D.

## 3 Resultados

### 3.1 O modelo

O sistema investigado é um ponto de contato quântico (QPC, do inglês *quantum point contact*) baseado no efeito Hall quântico de spin Hall. Como discutido na seção 1.1.5, este fenômeno possui pares de Kramer que representam os canais de condução de corrente de spin presentes nas bordas do material. Como este efeito é observado em isolantes topológicos, propomos um dispositivo bidimensional baseado na heteroestrutura de HgTe, em que a região central apresenta um tipo de constrição geométrica. A Fig.14 ilustra este dispositivo.

As propriedades de transporte dependente de spin que este dispositivo possui são descritas pelo Hamiltoniano do modelo BHZ,

$$H = \epsilon(k)\mathbb{1} + \begin{pmatrix} M - Bk^2 & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -(M - Bk^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - Bk^2 & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -(M - Bk^2) \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

onde  $\epsilon(k) = C + Dk^2$ . Em nossas análises, consideramos que a energia de Fermi  $\epsilon_f$  está

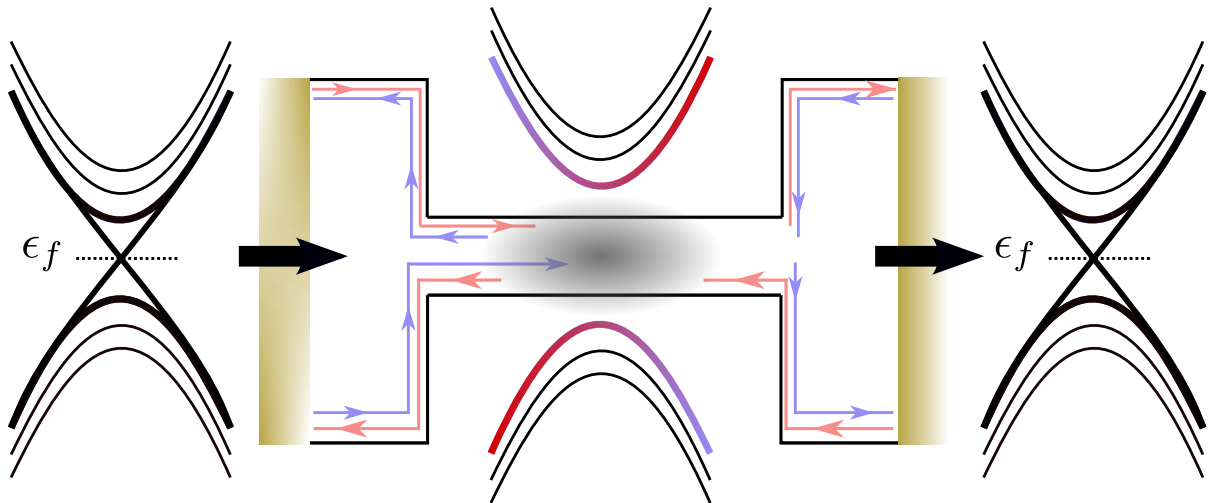


Figura 14 – Esta figura ilustra o sistema analisado. As cores em amarelo do lado esquerdo e direito representam respectivamente os eletrodos  $L$  e  $R$  que nos referimos ao longo desta seção. A estrutura de bandas nestes eletrodos é linear em  $k$  e não possui gap. Os autoestados de spin-up e spin-down são injetados no centro espalhador a partir do eletrodo  $L$ . Devido a constrição, estes autoestados se hibridizam (a mancha ilustrada no centro da constrição representa esta hibridização). Após atravessarem esta região, estes autoestados são capturados no eletrodo  $R$

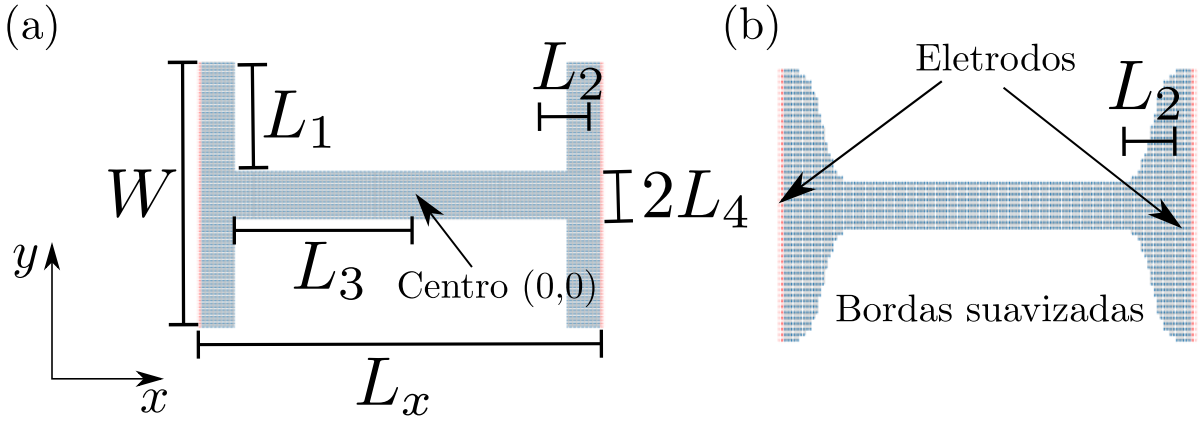


Figura 15 – (a) Esquema das medidas que envolvem o sistema estudado. Essa imagem mostra como podemos controlar os parâmetros  $L_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4, 5$ ) do sistema. (b) Esta figura ilustra a possibilidade de suavizar a entrada do canal da região de constricção variando o parâmetro  $L_2$ .

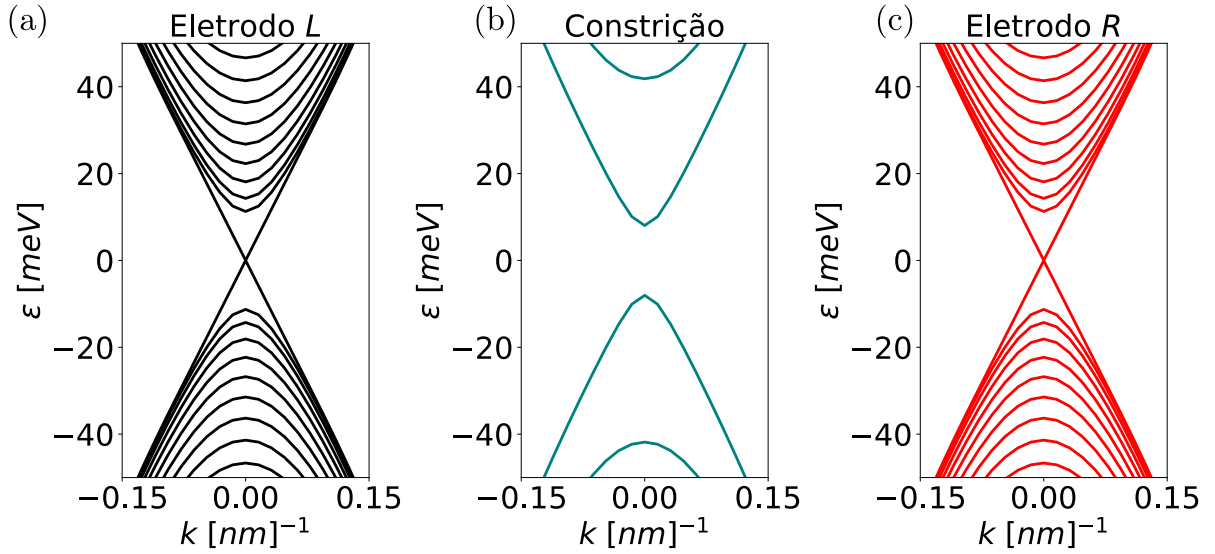
na origem, portanto consideramos que  $C = 0$ . Além disso, também consideramos que não há quebra de simetria entre as bandas de valência e condução desse sistema e portanto,  $D = 0$ .

O centro de coordenada do sistema está em  $(x, y) = (0, 0)$  e os parâmetros  $2L_x = 600nm$ ,  $L_4 = 22.0nm$  correspondem respectivamente a largura do dispositivo e o tamanho da constricção em relação a este centro de coordenada. O parâmetro  $L_2$  controla a suavidade para a entrada dos estados de borda no canal da região de constricção. Quanto menor o valor de  $L_2$ , menos suave é esta entrada. Em nossos estudos consideramos  $L_2 = 0$  (os demais parâmetros  $L_i$ , sendo  $i = 1, 2, 3, 4, 5$  estão ilustrados na Fig.15). Os reservatórios do lado esquerdo (eletrodo  $L$ ) e do lado direito (eletrodo  $R$ ) conectados ao centro espalhador (região  $C$ ) são invariantes na direção  $x$  e possuem altura finita  $-W < y < W$ . A relação de dispersão dos elétrons nestes reservatórios não possuem gap, como ilustrado na Fig.14. A função de onda que representa os estados do bloco superior e inferior do Hamiltoniano (escritas na base de  $|E1, \uparrow\rangle$ ,  $|H1, \uparrow\rangle$  e  $|E1, \downarrow\rangle$ ,  $|H1, \downarrow\rangle$ ) foram calculados na seção (2.1.1) para o caso de um plano semi-infinito em que as condições de contorno eram  $\psi(y \leq 0) = 0$ . Para os estados confinados em  $-W < y < W$ , consideramos que  $W$  é grande o suficiente para que os estados de borda das bordas opostas não interajam entre si. Fazendo isto, generalizamos o resultado encontrado na seção (2.1.1), para condições de contorno onde  $\psi(y \geq W) = 0$  e  $\psi(y \leq -W) = 0$ . De acordo com o movimento dos estados pelas bordas do material, dizemos então que

$$\begin{cases} \psi_{E1, \uparrow} \propto \left( e^{\lambda+(y-W)} - e^{\lambda-(y-W)} \right) e^{ik_x x} \\ \psi_{E1, \downarrow} \propto \left( e^{\lambda+(y-W)} - e^{\lambda-(y-W)} \right) e^{-ik_x x} \end{cases}, \quad (y \geq W) \quad (3.2)$$



Figura 16 – Os gráficos desta figura ilustram a estrutura de bandas do (a) eletrodo esquerdo, (b) região de constrição e (c) eletrodo direito



e

$$\begin{cases} \psi_{E_{1,\downarrow}} \propto \left( e^{-\lambda_+(y+W)} - e^{-\lambda_-(y+W)} \right) e^{ik_x x} \\ \psi_{E_{1,\uparrow}} \propto \left( e^{-\lambda_+(y+W)} - e^{-\lambda_-(y+W)} \right) e^{-ik_x x} \end{cases}, \quad (y \leq W). \quad (3.3)$$

O valor  $\lambda_{\pm}$  é calculado através da expressão

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{k_x^2 + F \pm \sqrt{F^2 - \left( \frac{M^2 - \epsilon^2}{B^2} \right)}}, \quad F = \frac{A^2 - 2BM}{2B^2}, \quad (3.4)$$

em que  $\lambda_{\pm} > 0$ . O valor do comprimento de penetração  $l^{-1} = \lambda$  é determinado pelo maior valor entre os valores de  $\lambda_+$  e  $\lambda_-$ . Para  $\epsilon = k_x \approx 0$ , e os parâmetros  $A = 375 \text{ meV nm}$ ,  $B = -1120 \text{ nm}^2$ , e  $M = -10 \text{ meV}$ , o comprimento de penetração destes estados é  $l^{-1} \approx 34.2 \text{ nm}$ . Toda a discussão feita até aqui, está de acordo com os modelos quando  $W$  é muito grande. A medida com que este valor diminui, os autoestados da borda superior do material começam a "enxergar" os autoestados da borda inferior. Em nosso sistema, o  $W = L_1$  permanece constante na região dos eletrodos enquanto que assume o valor  $W \rightarrow 2L_4 = 44.0 \text{ nm}$  na região do centro espalhador. Este valor cria uma constrição geométrica no dispositivo. Quando os autoestados atravessam esta região de constrição, se hibridizam e abrem um gap  $\delta$  na estrutura de bandas, como ilustra a Fig.16(b). O valor da abertura deste gap corresponde a  $\delta \approx 16.0 \text{ meV}$ .

Após esta breve discussão sobre o modelo que é o foco deste trabalho, vamos abordar nas próximas seções sobre os fenômenos de transporte observados ao longo da constrição. Para isso, começamos nossa discussão analisando os fenômenos relacionados a densidade de corrente de spin para o transporte considerando o caso sem impureza.

## 3.2 Análise do sistema sem impureza

A imagem da Fig. 17 resume os resultados encontrados na análise do sistema considerado. Neste sistema, não consideramos impurezas de nenhum tipo, i.e. escalar nem magnética, e a injeção de spin ao centro espalhador ocorre da esquerda (eletrodo ou fonte L) para direita (eletrodo ou dreno R). Como não há impurezas magnéticas, o isolante topológico conduz a corrente de spin perfeitamente pelas borda do material. Contudo, devido a constrição induzir a hibridização entre os autoestados da borda superior e da borda inferior, surgem padrões de interferência ao longo desta região. Isso porque esta hibridização leva os elétrons a possuírem uma velocidade menor do que aquela que inicialmente foram injetados. Basta observar que a velocidade do spin determinada pela equação  $v = (1/\hbar)\partial\epsilon/\partial k$ , que é menor na região de constrição se comparado com a velocidade que possuem ao saírem do eletrodo. Devido a isso, quando os spins tentam sair da região de constrição, as fases eletrônicas são refletidas de volta e geram padrões de interferência conhecidas como fenômeno de Fabry-Pérot. Estas interferências criam vórtices na região de constrição, como ilustrado no gráfico da Fig. 17(b-d). Este gráfico representa a densidade da corrente de spin-up para uma dada energia  $\epsilon$ , e as setas (girando no sentido anti-horário) nesta figura indicam a direção de propagação desta corrente. O número desses vórtices aumenta na região de constrição a medida que os elétrons com mais energias são injetados na região de espalhamento. Note que para a energia  $\epsilon \approx 8.4$  meV há a formação de um único vórtice, para  $\epsilon \approx 9.5$  meV há dois vórtices,  $\epsilon \approx 10.8$  meV três vórtices, e assim por diante. Quando a corrente de spin injetada no sistema corresponde a corrente de spin-down, o comportamento observado é o mesmo, no entanto o fluxo da densidade de corrente gira no sentido horário.

Ao analisarmos o gráfico da condutância Fig. 17(a), percebemos que o número de vórtices no interior da constrição, está diretamente ligado com número de picos que surgem na condutância. Estes picos são caracterizados por energias muito específicas e representam os estados que são transmitidos perfeitamente do eletrodo L para o eletrodo R. Estes estados transmitido (também chamados de estados ressonantes) apresentam condutância  $G = 1[e^2/h]$ .

Como estamos preocupados com sistemas em baixas energias, não é de interesse ter estados de bulk sendo transportado no sistema. Isso porque quando os estados de bulk também contribuem para a condução, o número de autoestados que interferem entre si aumenta, e nenhuma formação de vórtice é claramente observada. Em geral, isso ocorre para energias em que a condutâncias é igual ou maiores que  $G = 2[e^2/h]$ .

Os resultados que relacionam os picos com o número de vórtices são análogos a aqueles encontrados no diodo túnel ressonante. Neste regime, somente as ondas propagantes correspondentes a níveis de energia específicos são permitidos conduzir perfeitamente entre as barreiras de potenciais. Analogamente, no nosso sistema, somente alguns estados

de energia exibem condutância perfeita, i.e.,  $G = 1[e^2/h]$ . Note também que quando a energia corresponde a um vale, os modos propagantes se hibridizam e formam um número semi-inteiro de vórtice no interior da constrição. Ou seja, o primeiro vale corresponde a um vórtice e meio, o segundo, a dois vórtices e meio, e assim por diante.

Por fim, desejamos enfatizar um fator importante para prosseguirmos com nossa análise. Quando o número de vórtices no interior da constrição é par, as funções de onda se interferem destrutivamente e criam um ponto de nó em torno da coordenada  $x = 0$ . Isso é facilmente observado no gráfico da densidade de corrente da Fig 18. Devido a isso, nos perguntamos: como a densidade de corrente se comporta caso exista algum tipo de potencial de impureza próximo a essa coordenada ? A seção a seguir é destinada a responder esta pergunta.

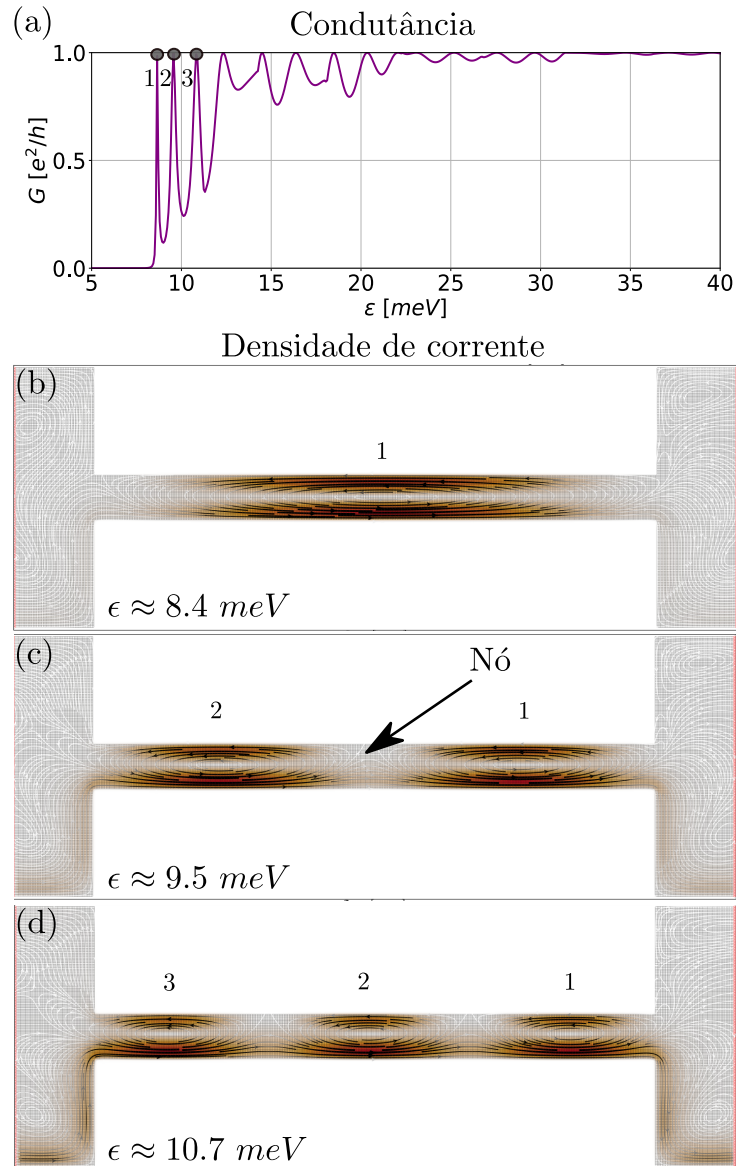


Figura 17 – O gráfico da figura (a) representa a condutância em relação a energia da corrente de spin injetada a partir do eletrodo  $L$ . Neste gráfico, há picos de ressonância que caracterizam uma transmissão perfeita ( $G = 1[e^2/h]$ ) realizada através do dispositivo da Fig. 14. A figura (b) representa o plot da densidade de corrente na região de constricção do dispositivo. Este gráfico mostra a formação de um vórtice no sentido anti-horário criado no interior da constricção quando a corrente de spin (com polarização spin-down) tem energia  $\epsilon \approx 8.4 \text{ meV}$ . Esta energia corresponde exatamente ao primeiro pico de ressonância do gráfico da figura (a). Quando a energia é  $\epsilon \approx 9.5 \text{ meV}$ , formam-se dois vórtices na região de constricção e há o surgimento um nó entre eles. Fato ilustrado na figura (b). A figura (c) representa a formação de três vórtices. Os valores 1, 2 e 3 relacionam os número de vórtices com o pico no gráfico da condutância.

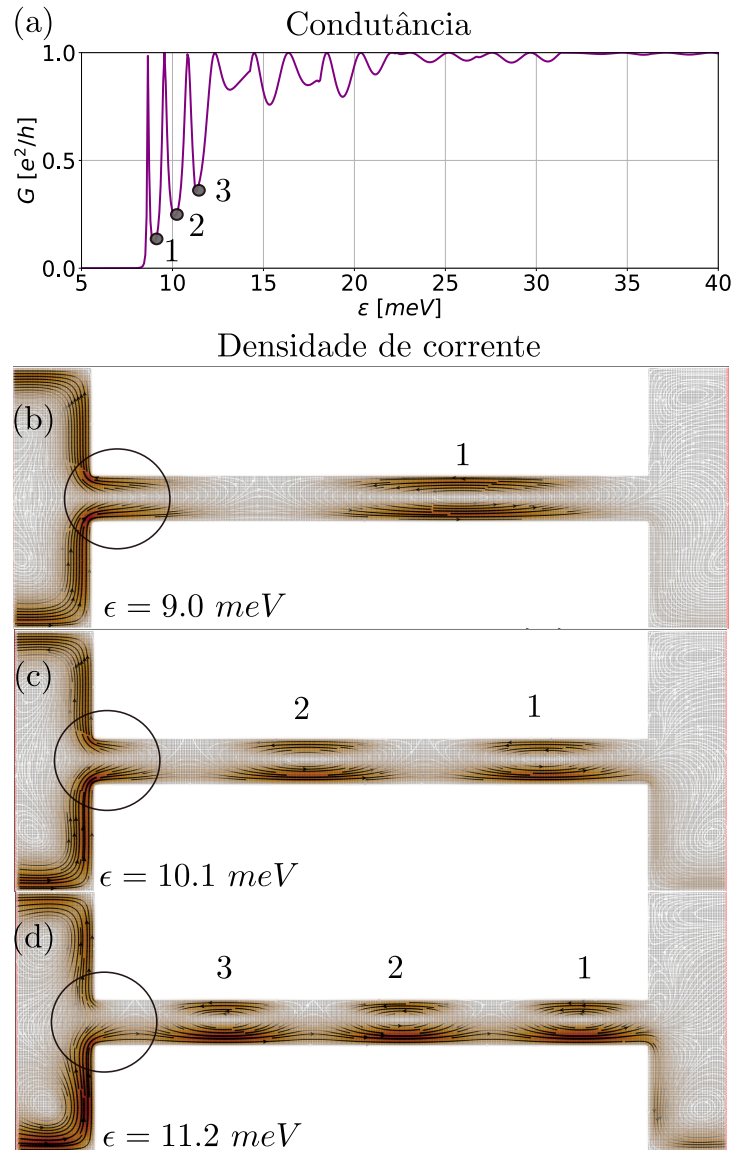


Figura 18 – O gráfico da figura (a) representa a condutância em relação a energia da corrente de spin injetada a partir do eletrodo L. Quando a energia  $\epsilon$  corresponde a um vale (representado pelos números 1, 2, 3), observa-se a formação de um numero inteiro de vórtices na região de constrição mais um vórtice incompleto na entrada do canal da região de constrição. O círculo desenhado nas figuras (b),(c) e (d) retratam quando este fenômeno acontece. Os valores 1, 2 e 3 indicados nos nestas figuras, contabilizam o número de vórtices em relação ao vale correspondente indicado na figura (a)

### 3.3 Casos com impurezas

Neste etapa, analisamos o comportamento da densidade da corrente de spin sob influência de um potencial de impureza  $V$ . Esta impureza representa um tipo de contato sobre a região de contração (e.g contato magnético). Vamos considerar esta impureza como sendo uma gaussiana localizada no ponto de nó formado no interior da contração quando o número de vórtices é par (veja a Fig 17). Como o Hamiltoniano da Eq. (3.1) é  $4 \times 4$ , definimos este potencial como uma gaussiana na forma

$$V = V_0 \exp\left\{\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\gamma^2}\right\} (\sigma_i \otimes \mathbf{1}), \quad (3.5)$$

onde  $V_0$  é a intensidade do potencial,  $(x_0, y_0)$  representam as coordenadas do centro da gaussiana,  $\gamma$  sua largura e  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ ) as matrizes de Pauli para o subespaço de spin-up e -down. Cada  $\sigma$  está relacionado com o tipo de potencial de impureza (i.e., escalar ou magnética). Em nosso modelo, a impureza está localizada na coordenada  $(x_0, y_0) = (0, L/4)$  e que os valores de  $V_0$  e  $\gamma$  são 15 e 10nm respectivamente. A posição escolhida para esta impureza, quebra a simetria espacial do sistema. Neste sistema também levamos em conta somente a injeção de corrente de spin polarizada. Iremos considerar novamente o sistema ilustrado na Fig.14 e investigar o comportamento dos picos de ressonância na condutância para cada tipo de polarização. Esta análise é interessante pois, cada tipo polarização interage de maneira diferente com o potencial de impureza  $V$ . Sendo assim, esperamos controlar esta polarização via este potencial.

#### 3.3.1 Potencial de impureza escalar $\sigma_0$

Para este tipo de impureza, o Hamiltoniano da Eq. (3.1) fica

$$H = H_{BHZ} + \begin{pmatrix} V(x, y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(x, y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V(x, y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(x, y) \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

O gráfico da Fig.19 resume os resultados encontrados para este tipo de impureza. A Fig.19(a) nos mostra que, em comparação com o caso sem impureza, o potencial  $\sigma_0$  desloca o primeiro pico de ressonância para mais altas energias, i.e.  $\epsilon = 8.4[meV] \rightarrow 8.7[meV]$ . A impureza  $\sigma_0$  é chamada de potencial escalar pois não mistura e nem altera a natureza do spin. O comportamento da densidade de corrente de spin-down e -up pode ser visualizada na Fig.19(b) e Fig.19(c) respectivamente. Note que quando a corrente possui polarização spin-down (Fig.19(b)), a corrente entra no sistema pela borda superior e cria vórtices no sentido horário. Quando a corrente possui polarização spin-up (Fig.19(c)) a corrente entra no sistema pela borda inferior e cria vórtices no sentido anti-horário. A consequência do deslocamento da energia para mais altas energias é observado pelo alargamento do

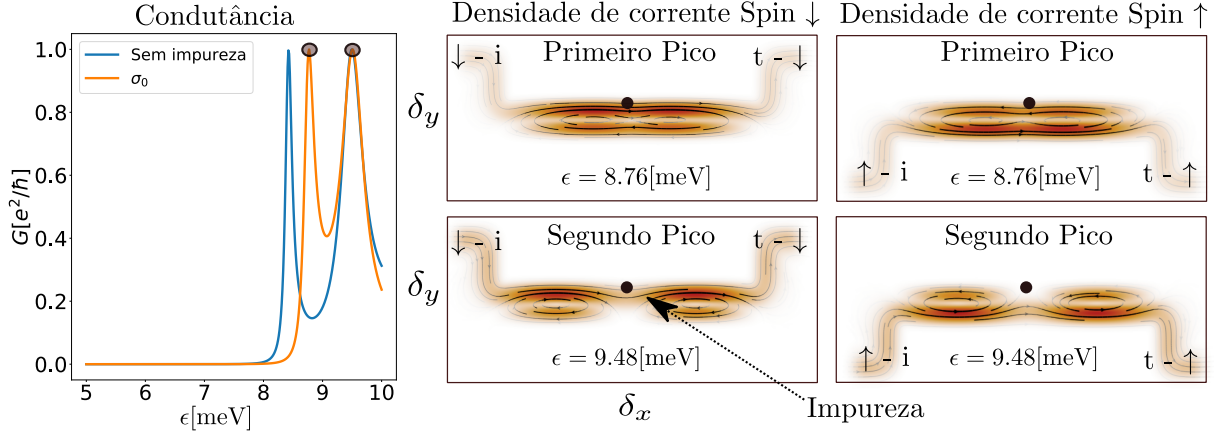


Figura 19 – (a) Gráfico da condutância quando uma corrente de spin polarizada é injetada no sistema. Neste caso em particular, este gráfico representa tanto a injeção de spin-up quanto de spin-down. (b) Representação da densidade de corrente de spin-down ao longo do dispositivo da Fig 14. Aqui, ilustramos os vórtices formado por esta corrente quando a energia corresponde ao primeiro pico de ressonância em  $\epsilon \approx 8.76$  meV e ao segundo pico quando  $\epsilon \approx 9.48$  meV. Para este tipo de spin a corrente entra no sistema ao longo da borda superior do dispositivo. Além disso, estes estados formam um vórtice que gira no sentido anti-horário. Quando injetamos corrente de spin-up no sistema, os autoestados se propagam ao longo do dispositivo pela borda inferior e formam vórtices que giram na direção horária.

vórtice formado pela densidade de corrente no primeiro pico. Este alargamento se deve a aproximação entre o primeiro pico e o segundo, onde há a formação de dois vórtices. Por meio da Fig.19, observamos que em ambos os casos o efeito do potencial de impureza foi o mesmo. Este resultado era esperado pois, a Eq. 3.6 nos informa que a adição do termo de potencial contribui de maneira igual para os dois sub-blocos do Hamiltoniano. Devido ao deslocamento para mais altas energias, o primeiro pico se aproxima do segundo. Note que o segundo pico de ressonância não foi afetado. Ou seja, não houve deslocamento se comparado ao caso sem impureza. Isto se deve a impureza se concentrar na região em que há um nó na densidade de corrente. Portanto, concluímos que a impureza  $\sigma_0$  não influencia nosso sistema quando formação dos vórtices no interior da constrição é par.

### 3.3.2 Potencial de impureza $\sigma_x$ ou $\sigma_y$

Quando a impureza é do tipo  $\sigma_x$  (ou  $\sigma_y$ ), o Hamiltoniano da Eq. (3.1) fica,

$$H = H_{BHZ} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & V(x, y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(x, y) \\ V(x, y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(x, y) & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

O gráfico da Fig.20 resume os resultados encontrados para este tipo de impureza para o caso da densidade de corrente spin-up. A Fig.21 resume o caso para o spin-down. Apesar

das impurezas  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$  se distinguirem por um sinal e pelo termo  $i$ ,

$$\sigma_x \otimes \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \otimes \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

os resultados encontrados na Fig. 20(a-c) e Fig. 21(a-c) são equivalentes. Portanto, em nossa discussão iremos focar somente no potencial de impureza  $\sigma_x$ . Note que esta impureza mistura os blocos de spin-up com spin-down. A consequência disto é: parte da polarização inicial da corrente de spin, é convertida na polarização oposta. Em outras palavras, se inicialmente a densidade de corrente é spin-up (spin-down) a impureza converte esta corrente em spin-down (spin-up). Este fato nos permite caracterizar este tipo de impureza como sendo uma impureza do tipo magnética.

Ao observar o gráfico da condutância da Fig. 20(a) e da Fig. 21(a), percebemos um desdobramento do primeiro pico de ressonância em outros dois, sendo um para mais baixas energias ( $\epsilon = 7.8 \text{ meV}$ ) enquanto o outro para as mais altas ( $\epsilon = 8.7 \text{ meV}$ ). Note também

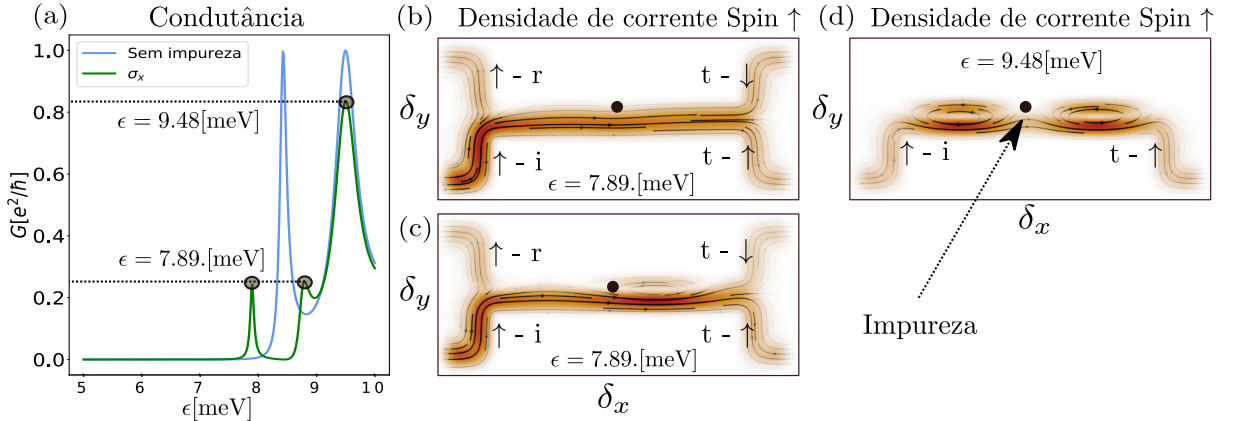


Figura 20 – A figura (a) representa o gráfico da condução da corrente de spin-up através da constricção geométrica representada na Fig. 14. A cor em azul neste gráfico representa a condutância quando não há nenhum tipo de impureza na constricção. O gráfico em verde representa a condutância quando consideramos o potencial de impureza  $\sigma_x$ . Neste gráfico, o primeiro pico de ressonância (em azul) se desdobra em outros dois picos (em verde) devido a presença da impureza (ou contato) magnética(o) na constricção. O comportamento da densidade de corrente correspondente a cada um destes picos pra o caso do potencial de impureza  $\sigma_x$ , está representado na figura (b) e (c). A figura (b) representa a energia do primeiro desdobramento. (c) representa a energia do segundo. Aqui, corrente injetada é spin-up ( $\uparrow - i$ ) entra no sistema pela borda inferior do dispositivo e na entrada da constricção, esta corrente é refletida ( $\uparrow - r$ ) de volta para o eletrodo através do canal de condução da borda de cima do sistema. A parte transmitida se separa em dois caminhos. Parte da condução é feita pelo canal da borda superior ( $t - \downarrow$ ) e parte pela borda do canal inferior ( $t - \uparrow$ ). A figura (d) representa a densidade de corrente para o segundo pico de ressonância quando  $\epsilon = 9.48 \text{ meV}$



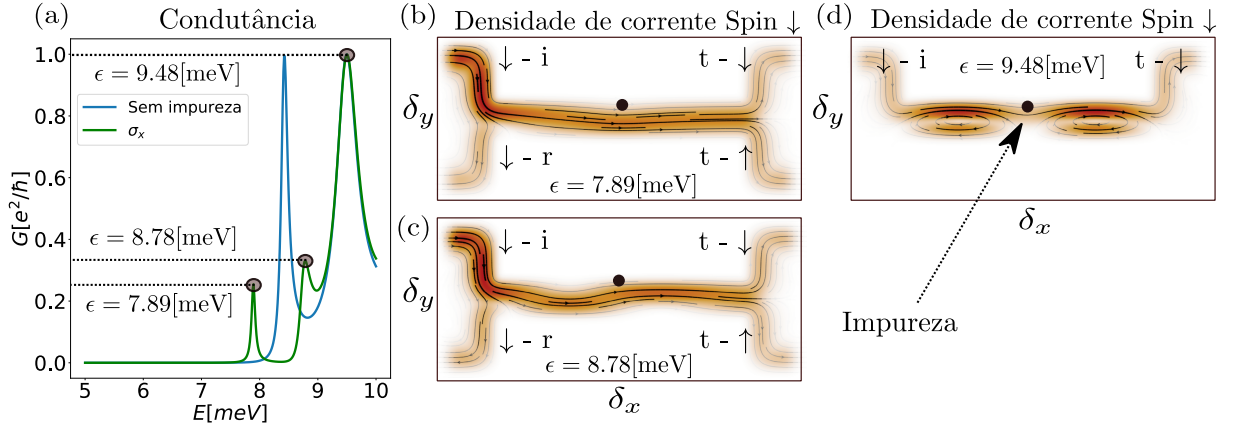


Figura 21 – A figura (a) representa o gráfico da condução da corrente de spin-up através da constricção geométrica representada na Fig. 14. A cor em azul neste gráfico representa a condutância quando não há nenhum tipo de impureza na constricção. O gráfico em verde representa a condutância quando consideramos o potencial de impureza  $\sigma_x$ . Neste gráfico, o primeiro pico de ressonância (em azul) se desdobra em outros dois picos (em verde) devido a presença da impureza (ou contato) magnética(o) na constricção. O comportamento da densidade de corrente correspondente a cada um destes picos pra o caso do potencial de impureza  $\sigma_x$ , está representado na figura (b) e (c). A figura (b) representa a energia do primeiro desdobramento. (c) representa a energia do segundo. Aqui, corrente injetada é spin-up ( $\downarrow - i$ ) entra no sistema pela borda superior do dispositivo e na entrada da constricção, esta corrente é refletida ( $\downarrow - r$ ) de volta para o eletrodo através do canal de condução da borda de inferior do sistema. A parte transmitida se separa em dois caminhos. Parte da condução é feita pelo canal da borda superior ( $t - \downarrow$ ) e parte pela borda do canal inferior ( $t - \uparrow$ ). A figura (d) representa a densidade de corrente para o segundo pico de ressonância quando  $\epsilon = 9.48$  meV

que a região entre o primeiro e o segundo pico de condutância, apresenta transmissão nula. Além disso, ambos os picos apresentam uma condutância muito baixa e não há formação de vórtices no interior da constricção Figs. 20(b) e 21(b). Apesar do deslocamento na energia ser o mesmo para ambos os casos, a intensidade dessas condutâncias são diferentes. Esse comportamento pode ser facilmente observado na Fig. 22(a) para a injeção de spin-up e na Fig. 23(a) para a injeção de spin-down. Para analisar esta situação consideramos a região  $R$  como um detector de spin de sinal oposto à aquele que inicialmente foi injetado, i.e., se a fonte injeta up (down), o dreno detecta down (up). As Figs. 22(b) e 23(b) ilustram esse fato e nos mostram os resultados para condutância para para o caso de injeção de corrente spin up e spin down respectivamente. A intensidade do segundo pico para a injeção de spin-down é diferente se comparado a intensidade apresentada pela corrente de spin-up. Os gráficos da Fig. 22(a) e 23 mostram essa diferença. Este contraste entre estas intensidades surgem devido a presença da impureza na parte superior da constricção, que quebra a simetria espacial do sistema. Ao observar o gráfico da densidade de corrente para cada caso, isto é, para quando injetamos spin-up e para quando injetamos

spin-down, notamos o surgimento de um nó no interior da constricção. Este nó depende da corrente de spin injetada. Quando a injetamos spin-down a condução da corrente ocorre pela borda de cima do material e o nó criado encontra-se na parte inferior da constricção. Em contrapartida, quando injetamos spin-up, a condução ocorre pela borda de baixo e o nó criado com o surgimento de dois vórtices, se concentra na parte superior da constricção. Este nó representa uma região em que não há autoestados disponíveis para que os autoestados da corrente de spin-up (-down) da borda inferior (superior) tunele para a borda superior (inferior) para que a condução prossiga ao longo da constricção. Para o caso particular da injeção de corrente com polarização spin-up, observamos que tal situação implica na maior reflexão da corrente para o eletrodo  $L$ . No entanto, esta reflexão ocorre por meio da conversão parcial da corrente de spin-up em corrente de spin-down, e o retorno desta mesma corrente para o eletrodo  $L$ ; eletrodo este pelo qual foi inicialmente injetada a corrente. Este fato está ilustrado nos gráficos da Fig 22(a)-(c). Aqui, o gráfico da Fig 22(a) representa a injeção de spin-up pelo eletrodo  $L$  e a detecção deste mesmo tipo de corrente no eletrodo  $R$ . As Figs 22(b) e (c) representam a situação em que há a injeção de corrente spin-up e a detecção de corrente spin-down no eletrodo  $R$  e no eletrodo  $L$  respectivamente. Ao comparar os resultados para os picos de ressonância em cada um destes gráficos, percebemos que o desdobramento dos dois primeiros picos correspondem aos dois primeiros picos encontrados tanto na Fig 22(b) e (c). No entanto, na Fig 22(c) há um terceiro pico em  $\epsilon \approx 9.48$  meV que corresponde ao segundo pico de ressonância do gráfico da Fig 22(a). O surgimento de uma condutância neste gráfico da Fig 22(c) nos sugere que a presença da impureza implica numa reflexão dos estados de

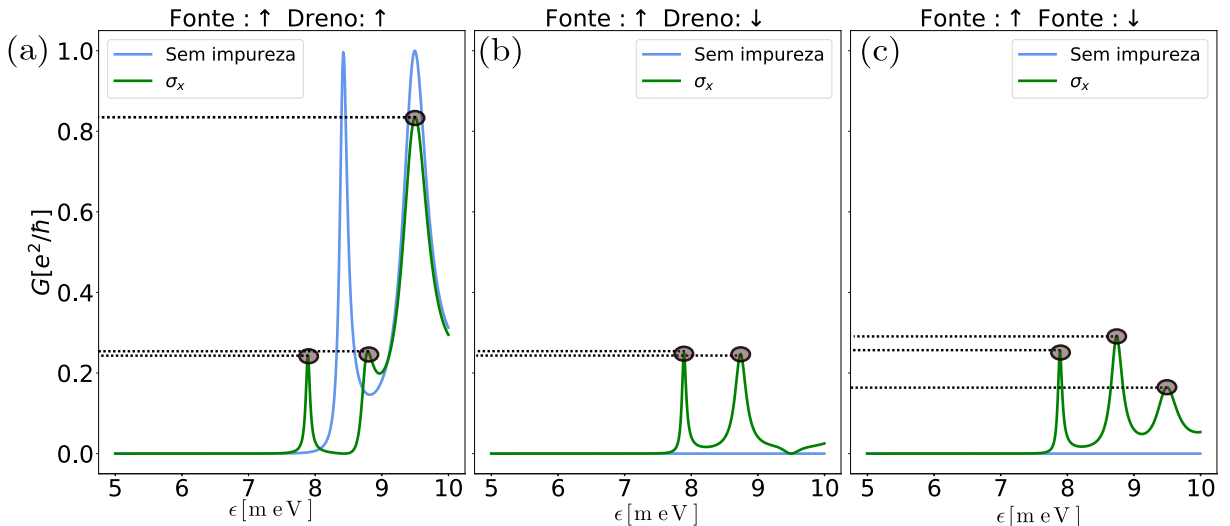


Figura 22 – Gráfico da condutância para casos em que a fonte (eletrodo da região  $L$ ) e o dreno (eletrodo da região  $R$ ) apresentam (a) injeção e coleta de spin-up, (b) injeção de spin-up e coleta de spin-down. (c) injeção de spin-up pelo eletrodo  $L$  e a reflexão deste spin neste mesmo eletrodo  $L$ .

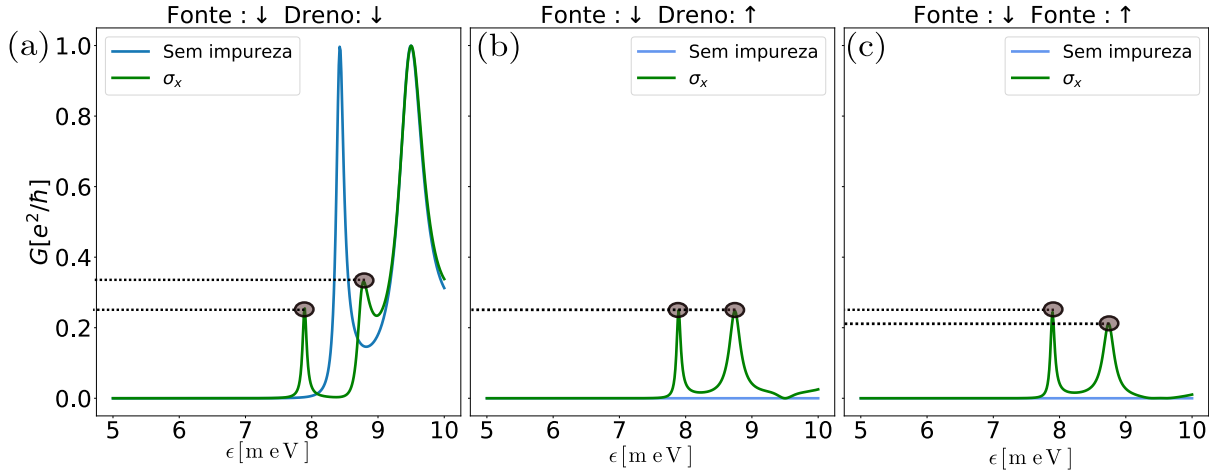


Figura 23 – Gráfico da condutância para casos em que a fonte (eletrodo da região  $L$ ) e o dreno (eletrodo da região  $R$ ) apresentam (a) injeção e coleta de spin-down, (b) injeção de spin-down e coleta de spin-up. (c) injeção de spin-down pelo eletrodo  $L$  e a reflexão deste spin neste mesmo eletrodo  $L$ .

spin-up que saem do eletrodo  $L$  para o próprio eletrodo  $L$ . No entanto, agora, com spin de sinal oposto. Devido a isto, a condutância não apresenta uma transmissão perfeita ao longo da constrição, como mostra a Fig 22(a). Note que este fato descrito acima para o caso da injeção de corrente de spin-up não é válida para quando injetamos corrente de spin-down no sistema. Isto porque a localização da impureza na parte superior da constrição não implicou numa maior reflexão dos estados de spin-up em estados de spin-down, fato observado no resultado da condutância ilustrado no gráfico da Fig 23(a) em que a condutância permanece perfeita (i.e.  $G = 1e^2/h$ ) no segundo pico; e não há o surgimento de um terceiro pico caracterizando uma reflexão de spin-down em spin-up na Fig 23(c).

Portanto, podemos concluir que a presença de um potencial de impureza  $\sigma_x$  na região superior da constrição, nos auxilia no controle da intensidade da corrente que reflete e que é transmitida ao longo do dispositivo. Em outras palavras, por meio deste potencial, controlamos quando a transmissão ao longo do dispositivo é perfeita, i.e.  $G = 1e^2/h$  ou quando é nula. Além disto, observamos que por meio deste tipo de impureza controlamos a polarização da corrente de spin que foi inicialmente injetada no sistema.

### 3.3.3 Potencial de impureza $\sigma_z$

Quando a impureza é do tipo  $\sigma_x$  (ou  $\sigma_y$ ), o Hamiltoniano da Eq. (3.1) fica

$$H = H_{BHZ} + \begin{pmatrix} +V(x, y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +V(x, y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -V(x, y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V(x, y) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

O gráfico da Fig.24 resume os resultados encontrados para este tipo de impureza para o caso da densidade de corrente spin-up. A Fig.25 resume o caso para o spin-down. O potencial de impureza  $\sigma_z$  não mistura spin, porém atua em cada bloco  $2 \times 2$  da matriz da Eq. (3.9) de maneira diferente. No bloco de spin-up (i.e. o bloco superior), a impureza soma um termo de energia na diagonal principal. Isso faz com que o primeiro pico de ressonância observado no gráfico da Fig.24(a) desloque-se para mais altas energias e portanto  $\epsilon \approx 8.4meV \rightarrow \epsilon \approx 8.7meV$ . Porém, no bloco de spin-down (i.e. o bloco inferior), o potencial de impureza  $V(x, y)$  subtrai. Conseqüentemente, o primeiro pico de ressonância desloca-se para mais baixas energias  $\epsilon \approx 8.4meV \rightarrow \epsilon \approx 7.8meV$ . Note que para o caso da densidade de corrente de spin-up, a discussão é a mesma daquela realizada na seção 3.3.1. Nesta situação, ambos os gráficos da condutância e da densidade de corrente, coincidem. Quando a densidade de corrente corresponde ao spin-down, a situação é um pouco diferente. Como o pico de ressonância deslocou-se para uma energia menor, a formação do vórtice não apresenta alargamento. Em outras palavras, esta configuração de energia favorece a formação de um único vórtice bem localizado na região central da constricção.

O fato do potencial de impureza tipo  $\sigma_z$  não misturar as componentes de spin-up com as de spin-down, o eletrodo da região  $R$  não detecta corrente de spin de sinal oposto. Isto é fácil de visualizar nas Fig. 26(b) e 26(b), em que a condutância permanece nula para todo o espectro de energia  $\epsilon$  quando injetamos spin-up (down) e detectamos spin-down (up). Não o bastante, quando analisamos a reflexão da corrente de spin, também percebemos que a condutância da corrente de sinal oposto é nula, fato ilustrado nos gráficos das Fig. 26(c) e 26. Vale ressaltar que novamente observamos a formação de dois vórtices para a energia  $\epsilon = 9.4meV$ .

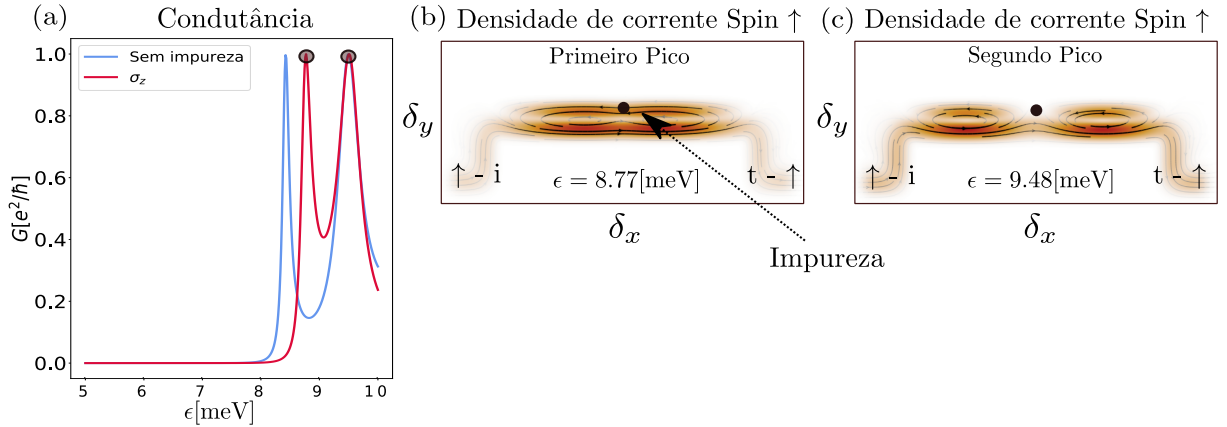


Figura 24 – (a) Gráfico da condutância quando o sistema está sob influencia do potencial de impureza  $\sigma_z$ . Quando injetamos spin-up no sistema, o primeiro pico de ressonância desloca-se para energias mais altas. Em contra partida, o segundo pico não apresenta nenhum deslocamento. (b) Densidade de corrente para energia que corresponde o primeiro pico de ressonância para o caso de impureza. Aqui, a incidência ( $\uparrow - i$ ) ocorre pela borda inferior do sistema e é transmitida ( $t - \uparrow$ ) por esta mesma borda. O vórtice criado está no sentido anti-horário. (c) Representação da densidade de corrente para o segundo pico de energia.

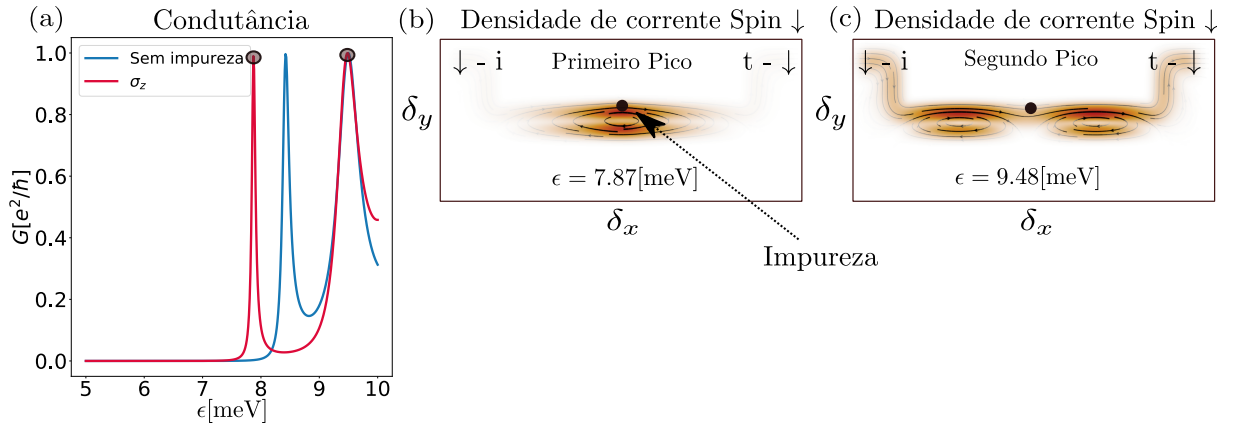


Figura 25 – (a) Gráfico da condutância quando o sistema está sob influencia do potencial de impureza  $\sigma_z$ . Quando injetamos spin-down no sistema, o primeiro pico de ressonância desloca-se para energias mais baixas. Em contra partida, o segundo pico não apresenta nenhum deslocamento. (b) Densidade de corrente para energia que corresponde o primeiro pico de ressonância para o caso de impureza. Aqui, a incidência ( $\downarrow - i$ ) ocorre pela borda superior do sistema e é transmitida ( $t - \downarrow$ ) por esta mesma borda. O vórtice criado está no sentido horário. (c) Representação da densidade de corrente para o segundo pico de energia.

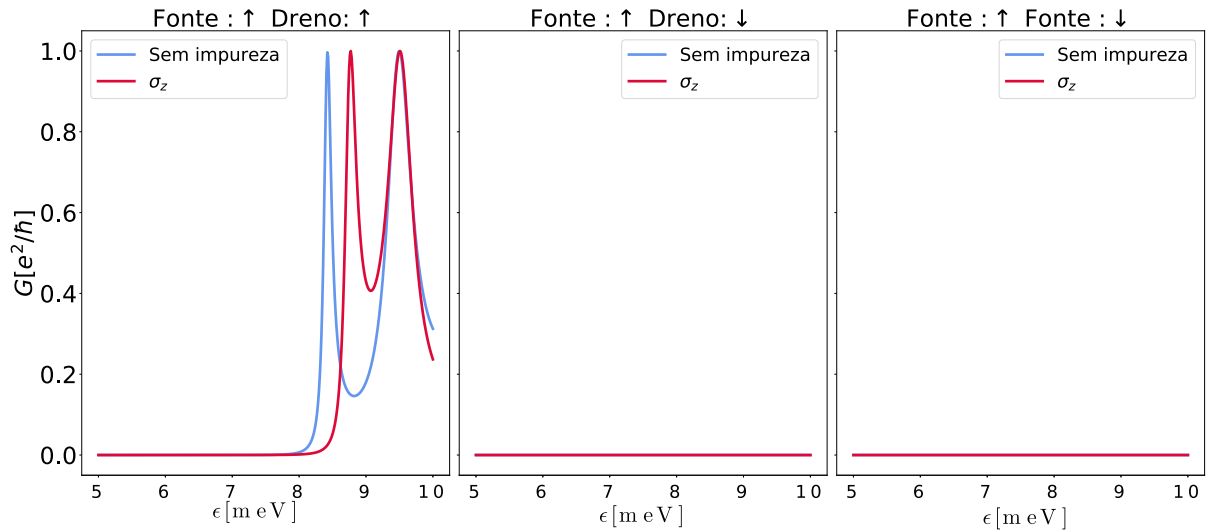


Figura 26 – Gráfico da condutância para casos em que a fonte (eletrodo da região  $L$ ) e o dreno (eletrodo da região  $R$ ) apresentam (a) injeção e coleta do mesmo tipo de spin. (b) injeção e coleta de spins opostos. Como neste caso injetamos spin-up no sistema, o potencial de impureza do tipo  $\sigma_z$  desloca o primeiro pico de ressonância para mais altas energias. Como esta impureza não altera a dinâmica da corrente de spin, os resultados para a condutância quando a fonte injeta spin oposto ao que o dreno absorve são nulos. Fato observado nas figuras (b) e (c).

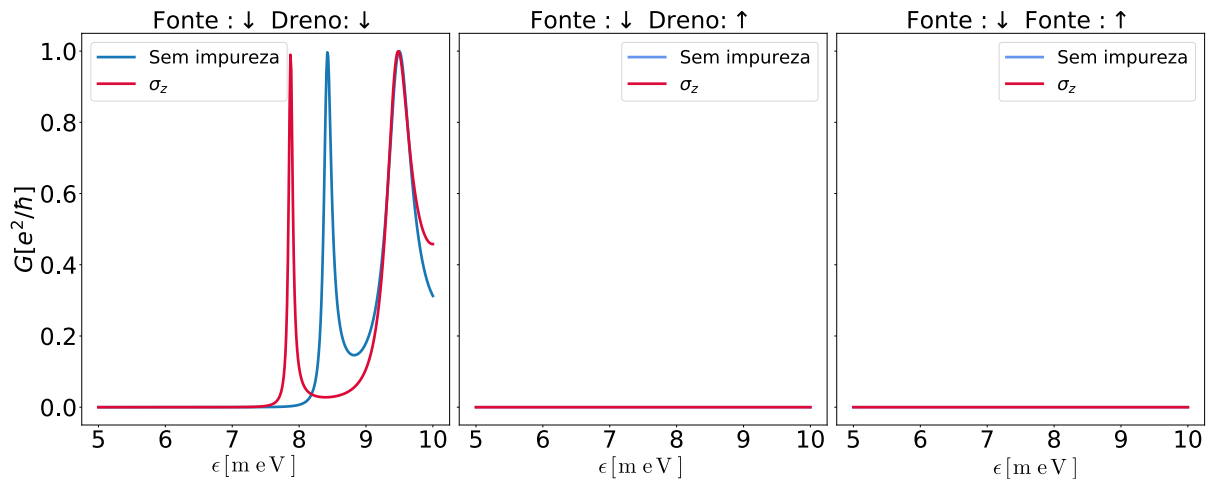


Figura 27 – Para a análise destes gráficos, injetamos corrente de spin-down no sistema. Os significados e a interpretação dos resultados, são idênticos ao discutido anteriormente na Fig. 26)

### 3.4 Perspectivas futuras

A fim de continuar explorando as propriedades de transporte dependente de spin, a próxima etapa deste trabalho é analisar um sistema em que há dois contatos magnéticos na região de constrição. Com isto, vamos analisar o transporte quando as configurações destes contatos são paralelas e antiparalelas, como ilustrado na Fig. 28(a). Além disso, também vamos estudar a questão de controlar o direcionamento do transporte de spin propondo o dispositivo ilustrado na Fig. 28(b)

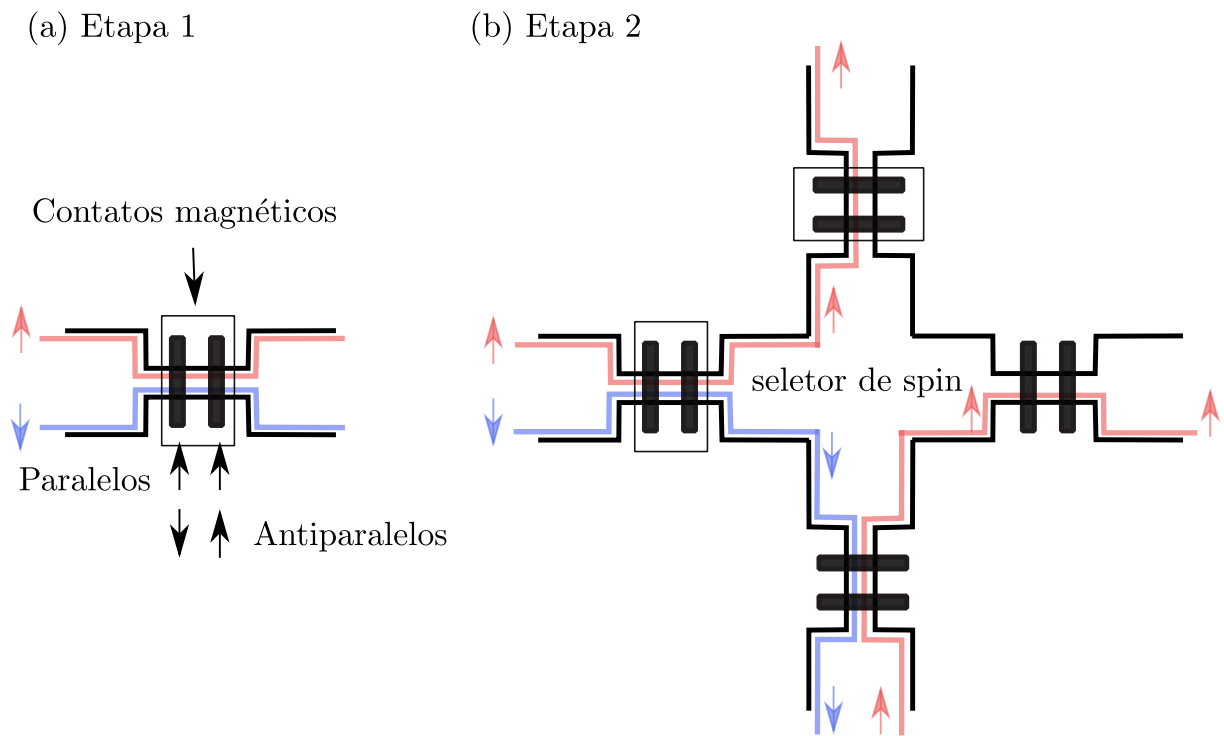


Figura 28 – (a) Proposta de estudo 1: analisar o transporte de spin quando há dois contatos magnéticos na região de constrição. (b) Proposta de estudo 2: controlar o direcionamento do transporte de spin

## 4 Conclusão

Nesta dissertação, investigamos o transporte eletrônico envolvendo isolantes topológicos em regime de constrição geométrica. Mais especificamente, revisamos o conceito de transporte na literatura e exploramos suas propriedades em sistemas com spins utilizando matriz de transferência. Além disso, calculamos numericamente a condutância entre dois contatos terminais e também analisamos a dinâmica da corrente de spin para nosso sistema sob diversos regimes. O primeiro caso que estudamos considerou a injeção de spins não polarizados na região de espalhamento. Observamos que para uma certa largura da constrição, os autoestados de cada borda do sistema de QSHE se sobrepõem (hibridizam) e abrem um gap na estrutura de bandas do centro espalhador. Como consequência, surgem padrões de interferência de Fabry-Pérot nesta região. Esses padrões são caracterizados pela criação de vórtices no interior da constrição pela dinâmica da corrente de spin. Além disso, o número de vórtices nesta região está diretamente ligada com picos de ressonância muito bem definidos no gráfico da condutância. Em particular, notamos que no segundo pico, surge um par de vórtices com um nó entre eles na região central da constrição. Na tentativa de manipular e compreender a formação desses vórtices, introduzimos uma impureza no interior desta constrição que afeta somente os picos correspondentes ao número ímpar de vórtices; também consideramos a injeção de corrente de spin polarizada. Para esta impureza, caracterizada por uma gaussiana, consideramos dois casos: o primeiro de um potencial escalar e o segundo de um magnético. No caso do potencial escalar, observamos que houve deslocamento do primeiro pico de ressonância para mais altas energias. Além disso, devido a posição espacial da impureza, quando o número de vórtices no interior da constrição correspondia a um número ímpar, a dinâmica da corrente de spin apresentou um alargamento na formação de seu vórtice. Este fato também foi observado quando o potencial de impureza magnético era do tipo  $\sigma_z$ . Nos casos em que a impureza magnética era  $\sigma_x$  ou  $\sigma_y$ , o spin muda parcialmente sua orientação e a condutância para aquele tipo de polarização que foi inicialmente injetado no sistema, é drasticamente afetada. Por meio dos resultados apresentados, afirmamos que este sistema é um bom candidato para ser um dispositivo de filtro de spin baseado em isolantes topológicos.



# Referências

- 1 BADER, S.; PARKIN, S. Spintronics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, v. 1, p. 71–88, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-070909-104123>>.
- 2 ŽUTIĆ, I. et al. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys*, APS, v. 76, p. 489, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.323>>.
- 3 GRÜNBERG, P. A. Nobel lecture: From spin waves to giant magnetoresistance and beyond. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 80, n. 4, p. 1531, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1531>>.
- 4 BERNEVIG, B. A.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 96, n. 10, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.106802>>.
- 5 BUHMANN, H. The quantum spin hall effect. *Journal of applied physics*, American Institute of Physics, v. 109, n. 10, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3577612>>.
- 6 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. The quantum spin hall effect and topological insulators. *Physics today*, American Institute of Physics, v. 63, n. 1, p. 33–38, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3293411>>.
- 7 TIAN, W. et al. The property, preparation and application of topological insulators: a review. *Materials*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 10, n. 7, p. 814, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/ma10070814>>.
- 8 SHANKAR, R. *Topological Insulators – A review*. 2018.
- 9 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: topological insulators. *Reviews of modern physics*, APS, v. 82, n. 4, p. 3045, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045>>.
- 10 KÖNIG, M. et al. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1148047>>.
- 11 KÖNIG, M. et al. The quantum spin hall effect: Theory and experiment. *Journal of the Physical Society of Japan*, Physical Society of Japan, v. 77, n. 3, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.77.031007>>.
- 12 DIENY, B. et al. Opportunities and challenges for spintronics in the microelectronic industry. *arXiv preprint arXiv:1908.10584*, 2019.
- 13 HALL, E. H. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, JSTOR, v. 2, n. 3, p. 287–292, 1879. Disponível em: <<https://doi.org/10.2307/2369245>>.
- 14 MAXWELL, J. C. *A treatise on electricity and magnetism*. [S.l.]: Clarendon press, 1881. v. 1.

- 15 KLITZING, K. von. The quantized hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 58, 1986. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.58.519>>.
- 16 SCHWARZSCHILD, B. Von klitzing wins nobel physics prize for quantum hall effect. *Physics Today*, v. 38, p. 17, 1985. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2814805>>.
- 17 KLITZING, K.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 494–497, 1980. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494>>.
- 18 KLITZING, K. v. The quantized hall effect. *Physica B+ C*, v. 126, p. 242–249, 1984. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0378-4363\(84\)90170-0](https://doi.org/10.1016/0378-4363(84)90170-0)>.
- 19 KLITZING, K. von. Quantum hall effect: Discovery and application. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, v. 8, p. 13–30, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031016-025148>>.
- 20 JIANG, Z. et al. Quantum hall effect in graphene. *Solid state communications*, Elsevier, v. 143, n. 1-2, p. 14–19, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2007.02.046>>.
- 21 TSUKAZAKI, A. et al. Quantum hall effect in polar oxide heterostructures. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 315, n. 5817, p. 1388–1391, 2007.
- 22 LIFSHITZ, I.; KOSEVICH, L. On the theory of the Shubnikov-de Haas effect. *Sov. Phys. JETP*, v. 6, p. 67–77, 1958. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.144401>>.
- 23 GRIGORIEV, P. Theory of the shubnikov–de haas effect in quasi-two-dimensional metals. *Physical Review B*, APS, v. 67, n. 14, p. 144401, 2003.
- 24 EZAWA, Z. F. *Quantum Hall Effects: Field Theoretical Approach and Related Topics Second Edition*. World Scientific Publishing Company, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/6242>>.
- 25 SPAVIERI, G.; MANSURIPUR, M. Origin of the spin–orbit interaction. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 90, n. 8, p. 085501, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0031-8949/90/8/085501>>.
- 26 BRANSDEN, B. H.; JOACHAIN, C. J.; PLIVIER, T. J. *Physics of atoms and molecules*. [S.l.]: Pearson education, 2003.
- 27 BERCIUUX, D.; LUCIGNANO, P. Quantum transport in Rashba spin–orbit materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 78, n. 10, p. 106001, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/106001>>.
- 28 SAKURAI, J. J.; COMMINS, E. D. *Modern quantum mechanics, revised edition*. American Association of Physics Teachers, 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.17781>>.

- 29 COMBESCOT, M.; SHIAU, S.-Y.; VOLIOTIS, V. Spin-orbit coupling: atom versus semiconductor crystal. *Physical Review B*, APS, v. 99, n. 24, p. 245202, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.245202>>.
- 30 MANCHON, A. et al. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 14, n. 9, p. 871–882, 2015.
- 31 DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Physical Review*, APS, v. 100, n. 2, p. 580, 1955. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.580>>.
- 32 DYAKONOV, M.; KHAETSKII, A. Spin hall effect. In: *Spin physics in semiconductors*. Springer, 2008. p. 211–243. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-3-540-78820-1\\_8](https://doi.org/10.1007/978-3-540-78820-1_8)>.
- 33 VIGNALE, G. Ten years of spin hall effect. *Journal of superconductivity and novel magnetism*, Springer, v. 23, n. 1, p. 3, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10948-009-0547-9>>.
- 34 DAY, C. Quantum spin hall effect shows up in a quantum well insulator, just as predicted. *Physics Today*, v. 61, n. 1, p. 010000, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2835139>>.
- 35 MOORE, J. E. The birth of topological insulators. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 464, n. 7286, p. 194, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature08916>>.
- 36 AVRON, J. E.; OSADCHY, D.; SEILER, R. A topological look at the quantum hall effect. *Physics today*, American Institute of Physics, v. 56, n. 8, p. 38–42, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1611351>>.
- 37 HU, G. et al. Piezotronic transistor based on topological insulators. *ACS nano*, ACS Publications, v. 12, n. 1, p. 779–785, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acsnano.7b07996>>.
- 38 GUO, X. et al. Quantum information memory based on reconfigurable topological insulators by piezotronic effect. *Nano Energy*, Elsevier, v. 60, p. 36–42, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2019.03.035>>.
- 39 FERREIRA, G. J. et al. Zitterbewegung and bulk-edge Landau-Zener tunneling in topological insulators. *Physical Review B*, APS, v. 98, n. 16, p. 165120, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.165120>>.
- 40 SHANKAR, R. *Principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 41 BERRY, M. V.; MONDRAGON, R. Neutrino billiards: time-reversal symmetry-breaking without magnetic fields. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 412, n. 1842, p. 53–74, 1987. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098/rspa.1987.0080>>.
- 42 ARAÚJO, A. et al. Interplay between boundary conditions and Wilson’s mass in dirac-like hamiltonians. *Physical Review B*, APS, v. 100, n. 20, p. 205111, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.205111>>.

- 43 RESENDE, B. M. de et al. Confinement and fermion doubling problem in dirac-like hamiltonians. *Physical Review B*, APS, v. 96, n. 16, p. 161113, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.161113>>.
- 44 BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 235411, Jun 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.235411>>.
- 45 TINKHAM, M. *Group theory and quantum mechanics*. [S.l.]: Courier Corporation, 2003.
- 46 BRUUS, H.; FLENSBERG, K. Introduction to many-body quantum theory in condensed matter physics. *University of Copenhagen*, 2002.
- 47 LANGRETH, D. Derivation of the Landauer conductance formula. *Phys. Rev. B*, v. 24, p. 2978, 1981. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.2978>>.
- 48 GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 6, p. 063065, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063065>>.
- 49 SHEN, S.-Q. **Topological insulators**. Springer, 2012. v. 174. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-642-32858-9>>.

## APÊNDICE A – Efeito Hall Clássico

No efeito Hall Clássico, o acúmulo de elétrons na borda deve-se a força de Lorentz. Para uma descrição mais completa sobre o comportamento do movimento eletrônico é necessário considerar a presença de impurezas no sistema. O modelo de Drude descreve a equação do movimento eletrônico sob influência destas impurezas como

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \mathbf{F}_f, \quad (\text{A.1})$$

em que  $F_f = -(m/\tau)\mathbf{v}$  está relacionada a impureza, onde  $\tau$  é o tempo de espalhamento entre colisões. Como estamos interessados em compreender como se comporta a densidade de corrente estacionária do elétron no efeito Hall, consideramos a situação de equilíbrio  $\mathbf{F} = 0$  e realizamos a substituição  $\mathbf{J} = (-e\eta\mathbf{v})$  na Eq. (A.1). Portanto, reescrevendo a Eq. (A.1) encontramos

$$\mathbf{J} = \frac{\eta e^2 \tau}{m} \left[ \mathbf{E} - \frac{\mathbf{J}}{\eta e} \times \mathbf{B} \right] \quad (\text{A.2})$$

Se o movimento eletrônico está restrito ao plano  $xy$  e  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , a solução para as componentes de  $\mathbf{J}$  é

$$J_x = \sigma_D E_x - \frac{\sigma_D B}{e\eta} J_y \quad (\text{A.3})$$

$$J_y = \sigma_D E_y + \frac{\sigma_D B}{e\eta} J_x \quad (\text{A.4})$$

onde  $\sigma_D = \eta e^2 \tau / m$ . Na forma matricial, a Eq. (A.4) torna-se

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_D^{-1} & B/\eta e \\ -B/\eta e & \sigma_D^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

e portanto, podemos escrever a Eq. (A.5) como  $\mathbf{E} = \rho\mathbf{J}$ , onde  $\rho$  é a matriz que representa a resistividade do material. As componentes  $\rho_{xx} = \rho_{yy} = \sigma_D^{-1}$  e  $\rho_{xy} = -\rho_{yx} = B/\eta e$  desta matriz, correspondem a resistividade do material, sendo as componentes  $\rho_{xy}$  e  $\rho_{yx}$  a resistividade Hall. Essa resistividade surge devido ao campo magnético  $B$  induzir uma corrente na direção  $\hat{y}$  quando um campo elétrico na direção  $\hat{x}$  é aplicado sobre o sistema. Note que se  $B = 0$ , as componentes  $\rho_{xy} = -\rho_{yx} = B/\eta e$  se anulam e conseqüentemente essa resistividade deixa de existir. Quando isso acontece, só existirá movimento eletrônico na direção do campo aplicado. Neste caso em específico, o movimento só ocorreria na direção  $x$ . Se invertermos  $\rho$  encontramos a matriz que representa a condutividade, que é

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = \sigma_D \begin{pmatrix} 1 & \omega B \\ -\omega B & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

onde  $\omega = eB/m$  representa o movimento ciclotrônico do elétron.

## APÊNDICE B – Efeito Hall quântico

Para representar matematicamente o efeito Hall quântico iremos partir de equações da mecânica clássica e em seguida quantizá-la. Para isso, considere um sistema bidimensional em que a partícula de carga  $e$  e massa  $m$  está sob a presença de um campo magnético  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$ . Vamos escrever a influência desse campo magnético por meio da equação  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , onde  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor, via acoplamento mínimo. O momento canônico dessa partícula descrito em termos da Lagrangiana  $\mathcal{L} = T - U$ , onde  $T$  é a energia cinética e  $U$  é a energia potencial, é  $\mathbf{p} = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{\mathbf{r}} = m\dot{\mathbf{r}} - e\mathbf{A}$ . O Hamiltoniano  $H$  desta partícula fica definido como

$$H = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} - \mathcal{L} = \left( \frac{\mathbf{p} + e\mathbf{A}}{m} \right) \mathbf{p} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2. \quad (\text{B.1})$$

Para tornar esta equação clássica, numa em que consideramos efeitos quânticos, escrevemos o momento  $p$  como um operador quântico, i.e.,  $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}$ . Agora, reescrevemos  $\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\Pi}}$ , e levemos em consideração as relações de comutação  $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ . Após todas estas etapas, podemos introduzir as variáveis conjugadas  $a$  e  $a^\dagger$  que representam respectivamente o operador de abaixamento e levantamento, como sendo respectivamente

$$a = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x - i\Pi_y), \quad e \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x + i\Pi_y), \quad (\text{B.2})$$

onde  $[a, a^\dagger] = 1$ . Por meio destes operadores da Eq. (B.2) reescrevemos a Eq. (B.1) como

$$H = \hbar\omega \left( aa^\dagger + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{B.3})$$

onde  $\omega = eB/m$  é a frequência ciclotron. A Eq. (B.3) representa um Hamiltoniano de um oscilador harmônico (comumente encontrado em livros básicos de mecânica quântica). Podemos, portanto, construir um espaço de Hilbert tal que  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ,  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  e  $a|0\rangle = 0$ , onde  $|n\rangle$  representa o estado quântico deste sistema. A solução para este Hamiltoniano é

$$E_n = \langle n|H|n\rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad \text{onde } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.4})$$

onde  $E_n$  representar a energia discretizada que descreve os níveis de Landau.

Para representar as bordas num sistema de efeito Hall quântico, consideramos um potencial escalar  $V$ . Em geral, quando se esta borda é suave, expandimos  $V$  em séries de Taylor próximo a borda e desconsideramos o primeiro termo da expansão (pois é uma constante qualquer). Se neste caso em particular, dizemos que o sistema é finito em na direção  $\hat{x}$  e invariante em  $\hat{y}$ , basta adicionar  $\partial V/\partial x$  na Eq.(B.1) e supor que  $\psi_{\nu, k_y}(x, y) = e^{ik_y y} \phi_{k_y}(x)$ , que o Hamiltoniano da Eq. (B.1) torna-se

$$H_x = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left( x + l_B^2 k_y \right)^2 + x \frac{\partial V}{\partial x} \quad (\text{B.5})$$

onde  $\partial V/\partial x$  é calculado em  $x = -l_B^2 k_y$ . Note que o último termo representa o campo elétrico atuando na direção  $x$ , uma vez que  $\partial V/\partial x = -eE$ . Ao somar  $(\pm l_B^2 k_y)\partial V/\partial x \pm (1/2m\omega^2)(\partial V/\partial x)^2$  a Eq. (B.5), lembrando que  $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ , e realizar o completamento de quadrado, obtemos:

$$H_x = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\left(x + l_B^2 k_y\right)^2 + x\frac{\partial V}{\partial x} \pm l_B^2 k_y \frac{\partial V}{\partial x} \pm \frac{1}{2m\omega^2}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 \quad (\text{B.6})$$

$$= \left[ \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + 2xl_B^2 k_y + l_B^4 k_y^2\right) + l_B^2 k_y \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{2m\omega^2}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 \right] + \Theta \quad (\text{B.7})$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left[ l_B^4 k_y^2 + \frac{2l_B k_y}{m\omega^2} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{m^2\omega^4}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 + x^2 + 2xl_B^2 k_y \right] + \Theta \quad (\text{B.8})$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left[ \left( l_B^2 k_y + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{1}{m\omega^2} \right) + x \right]^2 + \Theta \quad (\text{B.9})$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left[ \left( l_B^2 k_y - \frac{eE}{m\omega^2} \right) + x \right]^2 + \Theta = \frac{m\omega^2}{2}\left[ X + x \right]^2 + \Theta \quad (\text{B.10})$$

sendo,

$$\Theta = \frac{1}{2m}p_x^2 - l_B^2 k_y \frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{2m\omega^2}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2. \quad (\text{B.11})$$

Note que o Hamiltoniano da Eq.(B.10) fica na forma de um oscilador harmônico no qual o potencial está centrado em  $X = l_B^2 k_y - eE/m\omega^2$ :

## APÊNDICE C – Cálculo da função de onda

Neste apêndice, solucionamos a equação de Dirac com a correção quadrática em  $k$  baseado na referência[49]. Partindo da equação,

$$H = -iv\alpha\hbar\nabla + m\beta + \left(B\hbar^2\nabla^2\right)\beta. \quad (\text{C.1})$$

supomos um fio semi-infinito em  $y \leq 0$ . Se as condições para  $\alpha$  e  $\beta$  são satisfeitas (assim como discutido na seção 2) o Hamiltoniano da Eq. (C.1) é reescrito como uma matriz  $4 \times 4$  bloco diagonal, tal que  $H = h(k_y) \oplus h^*(-k_y)$ . Cada sub-bloco  $2 \times 2$  representa um tipo de spin, i.e. o bloco superior spin-up e o inferior spin-down sendo  $h(k_y)$  expresso pela equação

$$h(k_y) = \underbrace{Ak_y\sigma_y + M\sigma_z}_{\text{linear}} + \underbrace{(-B\sigma_z)k_y^2}_{\text{quadrático}}. \quad (\text{C.2})$$

onde  $A = \hbar v$ ,  $B$  e a massa de Dirac  $M$  são parâmetros do sistema. Para encontrar os autoestados deste Hamiltoniano, devemos solucionar a equação de Schrödinger  $h(k_y)|\psi_+(y)\rangle = \epsilon|\psi_+(y)\rangle$ , sendo o spinor  $|\psi_+(y)\rangle = \chi_\eta\phi(y)$ , onde  $\phi(y) \propto e^{\lambda y}$ . Como estamos interessados em encontrar estado de borda do sistema, tomamos o limite  $\epsilon = 0$ . Sendo assim, ao solucionando a Eq. de Schrödinger, obtemos:

$$\left[-iA\partial_y\mathbb{1}_{2 \times 2} + iM\sigma_x + iB\sigma_x\partial_y^2\right]\chi_\eta\phi(y) = \epsilon\chi_\eta\phi(y) = 0 \quad (\text{C.3})$$

onde  $k_y = -i\partial_y$ . Multiplicando pela esquerda, a matriz  $\sigma_y$ , encontramos a equação diferencial de segunda ordem,

$$\partial_y\left(\chi_n\phi(y)\right) = \frac{1}{A}\left(M + B\partial_y^2\right)\sigma_x\chi_n\phi(y). \quad (\text{C.4})$$

Note que a equação  $\chi_\eta\phi(y) = \eta\phi(y)$  apresenta autovalores  $\eta = \pm 1$ , sendo

$$\chi_{\eta=+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\eta=-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.5})$$

Portanto, a Eq. (C.4) torna-se

$$\left(\eta B\right)\phi_y'' - A\phi(y)' + \left(\eta M\right)\phi(y) = 0 \quad (\text{C.6})$$

$$\eta B\lambda^2 - A\lambda + \eta M = 0 \quad (\text{C.7})$$

A Eq. (C.7) é uma equação de segundo grau que admite dois valores para  $\lambda$ , i.e.,

$$\lambda_{\pm} = \frac{A}{2\eta B} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4MB}{A^2}} \right]. \quad (\text{C.8})$$



Note que devido a condição de contorno  $|\psi_+(y=0)\rangle = |\psi_+(y=-\infty)\rangle = 0$ , é necessário que  $Re(\lambda_{\pm}) > 0$ . Além disso, somente  $\eta = 1$  satisfaz esta mesma condição. Portanto, a expressão final para a função de onda é

$$\psi_+(y) = \frac{N}{\sqrt{2}} \left( e^{\lambda+y} + e^{\lambda-y} \right), \quad (\text{C.9})$$

sendo N a constante de normalização.

## APÊNDICE D – O código utilizado

A primeira parte deste apêndice destina-se a ilustrar de maneira didática, como re-escrever os resultados obtidos no Seção 2.6.1 no kwant. Na segunda parte mostramos o código que utilizamos para extrair os resultados presentes nesta dissertação. Este código está escrito de de uma maneira sucinta, otimizada, além incluir a presença de um potencial de impureza em nosso sistema. Para mais detalhes sobre como utilizar estas otimizações consulte[48].

### D.1 Código kwant 1. Método simples e sem impureza

```
#Bibliotecas
import kwant
import numpy as np

def make_the_system(dx):

    #####
    # Def. Sistema #
    #####

    # Geometria do centro espalhador
    F = lambda x: (2 + np.tanh((-13+12/2)+x)/12)-np.tanh(((13+12/2)+x)/12))/2;
    def scattering_region(pos):
        (x,y) = pos*dx
        if np.abs(y) <= (11*F(x)+14) and np.abs(x) <= Lx/2:
            return True
        else:
            return False

    # Inicializa a construção do sistema / Centro espalhador
    syst = kwant.Builder();

    # Definição da rede: discretização em rede quadrada
    lat = kwant.lattice.square(norbs=2);

    # Atribuindo o valor da energia ao centro espalhador
```

```

# E_onsite
syst[lat.shape(scattering_region, (0,0))] =
C*sig0 + (D*sig0 + B*sigz)*(-4/dx**2) + M*sigz

# E_hopping na direção x
syst[kwant.builder.HoppingKind((1, 0), lat, lat)] =
(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*s*A*sigx/(2*dx)

# E_hopping na direção y
syst[kwant.builder.HoppingKind((0, 1), lat, lat)] =
(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*A*sigy/(2*dx)

#####
# Eletrodos #
#####

# Inicializa a construção dos eletrodos L e R
lead_left = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry([-1,0]));
lead_right = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry([+1,0]));

# Definindo a posição dos eletrodos
def lead_type(pos):
    (x,y) = pos*dx
    if -(l1+l4) <= y <= (l1+l4):
        return True
    else:
        return False

#####
# Eletrodo L
#####
# Atribuindo o valor da energia ao eletrodo
# E_onsite
lead_left[lat.shape(lead_type, (l4/dx,l4/dx))] =
C*sig0 + (D*sig0 + B*sigz)*(-4/dx**2) + M*sigz

# E_hopping na direção x
lead_left[kwant.builder.HoppingKind((1, 0), lat, lat)] =

```

```

(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*s*A*sigx/(2*dx)

# E_hopping na direção y
lead_left[kwant.builder.HoppingKind((0, 1), lat, lat)] =
(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*A*sigy/(2*dx)

#####
# Eletrodo R
#####

# E_onsite
lead_right[lat.shape(lead_type, (l4/dx,l4/dx))] =
C*sig0 + (D*sig0 + B*sigz)*(-4/dx**2) + M*sigz

# E_hopping na direção x
lead_right[kwant.builder.HoppingKind((1, 0), lat, lat)] =
(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*s*A*sigx/(2*dx)

# E_hopping na direção y
lead_right[kwant.builder.HoppingKind((0, 1), lat, lat)] =
(D*sig0 + B*sigz)/dx**2 - 1j*A*sigy/(2*dx)

# Acopla os eletrodos ao centro espalhador
syst.attach_lead(lead_right);
syst.attach_lead(lead_left);

# Finaliza a construção do sistema e dos eletrodos
syst = syst.finalized();
lead_left = lead_left.finalized();
lead_right = lead_right.finalized();

return syst, lead_left, lead_right

```

## D.2 Código kwant 2. Otimizado e com impureza

```

# Bib.
import kwant
import numpy as np
import sympy as sy
from tqdm import tqdm
import kwant.continuum

# Defining the H_bhz parameters
def H_params():
    gaussian = lambda x,y,cx, cy, gamma:
        np.exp(-((x-cx)**2 + (y-cy)**2) / (2*gamma**2))
    A = 375; # meV.nm
    B = -1120; # meV.nm^2
    C = 0; # -6.5; # meV
    D = 0; #-730; # meV.nm^2
    M = -10; # meV
    i = 1j
    return dict(A=A, B=B, C=C, D=D, M=M, i=i, gaussian=gaussian)

def make_syst_unpolarized(grid, l1=100, l2=0.00001,
l3=230, l4=22.0, l5=70, vs=0, vx=0, vy=0, vz=0, cx=0, cy=0, gamma=0):

    ##### HAMILTONIAN DEFINITION

    Hlead = """ (C - D*(k_x**2 + k_y**2))*kron(sigma_0, sigma_0)
+ A*k_x*kron(sigma_z, sigma_x) + A*k_y*kron(sigma_0, sigma_y) +
(M-B*(k_x**2+k_y**2))*kron(sigma_0, sigma_z) """

    Hsyst = """ (C - D*(k_x**2 + k_y**2))*kron(sigma_0, sigma_0) +
A*k_x*kron(sigma_z, sigma_x) + A*k_y*kron(sigma_0, sigma_y) +
(M-B*(k_x**2+k_y**2))*kron(sigma_0, sigma_z)

+ vs*gaussian(x,y,cx,cy,gamma)*kron(sigma_0, sigma_0)
+ vx*gaussian(x,y,cx,cy,gamma)*kron(sigma_x, sigma_0)
+ vy*gaussian(x,y,cx,cy,gamma)*kron(sigma_y, sigma_0)
+ vz*gaussian(x,y,cx,cy,gamma)*kron(sigma_z, sigma_0) """

```

```

HL = kwant.continuum.discretize(Hlead, grid=grid,
locals={'vs':vs, 'vx':vx, 'vy':vy, 'vz':vz, 'cx':cx, 'cy':cy,
'gamma':gamma})
HS = kwant.continuum.discretize(Hsyst, grid=grid,
locals={'vs':vs, 'vx':vx, 'vy':vy, 'vz':vz, 'cx':cx, 'cy':cy,
'gamma':gamma})

##### SCATT AND LEAD SHAPES DEFINITIONS
Lx = 2*(l3+l2+l5)
F = lambda x: (2 + np.tanh((- (l3+l2/2)+x)/l2)-np.tanh(((l3+l2/2)+x)/l2))/2;
def shape(site):
    (x,y) = site.pos
    if np.abs(y) <= (l1*F(x)+l4) and np.abs(x) <= Lx/2:
        return True
    else:
        return False

def lead_shape(site):
    (x,y) = site.pos
    if -(l1+l4) <= y <= (l1+l4):
        return True
    else:
        return False

##### ONSITE AND ENERGY DEFINITIONS
syst = kwant.Builder();
syst.fill(HS, shape, (0,0));

#Lead
lead_up = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry([-grid,0]));
lead_up.fill(HL, lead_shape, (0,0));

syst.attach_lead(lead_up);
syst.attach_lead(lead_up.reversed());

return syst.finalized()

```

## D.3 Código kwant para o cálculo das propriedades físicas

```
##### GENERAL FUNCTIONS #####

# ----- eletronic bands calculation ----- #
def bands(H_params, syst, kmax, Npk,):

    k = np.linspace(-kmax, kmax, Npk)
    bands = kwant.physics.Bands(syst, params=H_params)
    en = [bands(kaux) for kaux in tqdm(k)]

    return k, en

# ----- conductance ----- #
# Total transmission probability from lead "j" to lead "i"
def conductance(H_params, syst, lead_j, lead_i, enmin, enmax, NpG):

    data = [];
    en = np.linspace(enmin, enmax, NpG)
    for en_aux in tqdm(en):
        smatrix = kwant.smatrix(syst, en_aux, params=H_params);
        data.append(smatrix.transmission(lead_j, lead_i))

    return en, data

# ----- Current density ----- #
# Densidade de corrente J where n = {0,1}; 0 = mode number // 1 = orbital number
def current_dens(H_params, syst, en,
    lead_incoming, wf=0, tipo=np.eye(4), sum_all_wf=False):

    wave_func = kwant.wave_function(syst, energy=en, params=H_params);
    J = kwant.operator.Current(syst, tipo);

    if sum_all_wf == False:
        return J(wave_func(lead_incoming)[wf], params=H_params)

    if sum_all_wf == True:
        Jbind = J.bind(params=H_params)
        return sum(Jbind(p) for p in wave_func(lead_incoming))
```