



Universidade Federal de Uberlândia

Infis (Instituto de Física)

TCC

**Estudo de Estados de Borda Topológicos
Induzidos por campo elétrico em Nanotubos
de Siliceno**

Aluno: João Victor Vilela Cassiano

Orientador: Prof. Dr. George Balster Martins

Uberlândia, Dezembro de 2020

Conteúdo

1	Resumo	7
2	Abstract	9
3	Introdução	10
4	Ferramentas para estudar o Siliceno	12
4.1	spin-órbita	12
4.1.1	Spin-Órbita para o Hidrogênio	12
4.1.2	spin-órbita do Tipo Rashba	15
4.2	Modelo Tight-Binding	16
4.3	Álgebra dos Operadores de Criação e Aniquilação	20
4.4	Nosso Hamiltoniano Efetivo	22
4.4.1	Vetores da Base	22
4.4.2	O Hamiltoniano Tight Binding	23
4.4.3	Modelo de Kane-Mele	26
4.4.4	Simetria de Paridade	28
4.4.5	Simetria de Reversibilidade Temporal	29
4.5	Propriedades e Características dos Nanotubos de Grafeno	30
5	Entender o Campo Elétrico em Nanotubos de Siliceno	33
5.1	Motivação para estudar o Siliceno	33
5.2	Modelo do Siliceno com Tigh-Binding Incluindo Acoplamento spin-órbita	33

5.3	Estrutura de Bandas de Nanofitas Zigue-Zague	35
5.4	Controlando Propriedades Topológicas com um Campo Elétrico	37
6	Resultados	39
6.1	Motivação para o estudo de Nanotubos de Siliceno sob campo elétrico	39
6.2	Resultados para o nanotubo de siliceno	41
6.2.1	Dependência do gap com diâmetro do nanotubo	43
6.2.2	Análise dos Estados de ‘Borda’	45
7	Conclusões	49
8	Agradecimentos	51

Lista de Figuras

1	Apresentação do Acoplamento Spin-Órbita	12
2	Vetores na base real e recíproca	22
3	Apresentação da rede do grafeno ('honeycomb')	31
4	Possíveis tipos de nanotubos	32
5	Espectro de uma fita de estaneno	36
6	Esquerda: Variação do gap Δ com a aplicação de um campo elétrico perpendicular ao plano do siliceno. Para $ E_z < E_c$ o isolante é topologicamente não-trivial enquanto que para $ E_z > E_c$ ele se torna um isolante de banda trivial. Centro: (superior) Nanotubo de siliceno obtido ligando as pontas; (inferior) curva de nível do nanotubo. Direita: Representação esquemática do efeito do campo elétrico . As partes superiores e inferiores do tubo se tornam topologicamente triviais (amarelo), já as laterais continuam não-triviais (verde). É esperado que a parede de domínio formada entre as duas regiões topologicamente distintas possua um estado de borda protegido por simetria de reversão temporal com polarização de spin fixada pelo momento linear, como consequência da interação spin-órbita.	38
7	Modelo proposto, onde as sub-redes A e B são diferenciadas pelas cores vermelho e azul. O gradiente ao fundo das sub-redes apresenta a intensidade do potencial eletrostático gerado com o referencial ($V = 0$) entre as duas sub-redes.	42

8	Estrutura de bandas para nanotubo armchair (32,32), ou seja, com 32 silícios em sua seção reta, para valores diferentes de spin-órbita e campo elétrico. (a) Tanto spin-órbita quanto campo elétrico são nulos, portanto o nanotubo é metálico (gap nulo) e a condução de carga ocorre através da seção reta toda do nanotubo; (b) $\lambda_{SO} = 0.1$ e campo nulo, portanto o nanotubo é um Isolante Topológico com gap $\Delta = 2\lambda_{SO} = 0.2$; (c) $\lambda_{SO} = 0.1$ e $E = 1.0$, onde o nanotubo está sofrendo uma transição de fase topológica, onde a condução de carga, através da seção reta toda do nanotubo [painel (a)], aqui vai ser substituída por canais helicoidais que vão se alojar ao longo das paredes de domínio que estão se formando nas laterais do nanotubo (evolução parcialmente mostrada na Fig. 11).	43
9	Evolução do campo crítico E_c	44

- 10 Variação do gap com a aplicação de um campo elétrico para um nanotubo com $n = 120$ e $\lambda_{SO} = 0.1$, cujo valor do gap para campo elétrico igual a zero é $\Delta = 0.2$. (a) Variação da posição do topo da banda de valência (ω_v , curva azul) e o fundo da banda de condução (ω_c , curva vermelha) como função do campo elétrico. (b) O gap Δ como função do campo elétrico E (curva verde) em um plot log-linear. Note que após um decaimento inicial mais lento, Δ decresce exponencialmente até $E = 1.05$. O pontilhado preto trata-se apenas de um guia para o leitor, enquanto os círculos vermelhos e triângulos azuis indicam valores de campo para os quais os estados foram analisados nas figuras da próxima seção. 45
- 11 (a) a (f): evolução do estado $K_{v\downarrow}$ para $0.01 \leq E \leq 0.4$. Nos painéis do topo, o estado gradualmente se estreita e começa a adquirir uma componente na sub-rede B. Nos painéis inferiores o peso espectral na sub-rede B continua a aumentar até que o estado esteja virtualmente com o mesmo peso espectral nas duas sub-redes [painel(f)]. Em adição, o estado gradualmente se separa até adquirir duas partes desconectadas. Esses seis valores de campo correspondem aos 6 círculos indicados na Fig. 10(b). Nesse contexto, o gap varia no intervalo $0.195 \leq \Delta \leq 4.0 \times 10^{-4}$ 47

12	(a) Estados de ‘borda’ para $n = 120$ e $E=0.9$. Os estados são os mesmos que os indicados no painel (b). (b) Dependência da posição angular dos estados de borda θ_i como função do campo elétrico E	48
13	Desenho esquemático da seção transversal do nanotubo de siliceno com as localizações dos canais helicoidais criados pelo campo elétrico. As setas indicam o movimentos dos canais conforme o campo elétrico aumenta, partindo de zero em uma sub-rede no topo e outra na parte de baixo e caminhando para as posições próximas às laterais do nanotubo (os valores de θ_i citados anteriormente) com o aumento do campo elétrico. . . .	49

Lista de Tabelas

1	Parâmetros característicos dos materiais	34
---	--	----

1 Resumo

Materiais tipo Siliceno (rede hexagonal, tipo grafeno, porém contendo átomos de Silício, Germânio, ou Estanho)[1] são Isolantes Topológicos não triviais. Isto significa que fitas tipo zigzag destes materiais apresentam estados metálicos de borda, com polarização de spin e protegidos por simetria de inversão temporal [2]. Tal propriedade faz com que se tornem sistemas de grande interesse para a possível fabricação de dispositivos eletrônicos de nova geração, ditos dispositivos spintrônicos [3] [4]. É sabido que a aplicação de um campo elétrico perpendicular à monocamada de siliceno pode causar uma transição de fase topológica [5], onde acima de um certo valor crítico de campo elétrico E_c , o material se torna um isolante trivial, ou seja, um isolante de banda, perdendo suas propriedades topológicas especiais (estados metálicos polarizados de borda na fita zigue-zague). Por outro lado, além das fitas de siliceno, nanotubos de siliceno já foram sintetizados em laboratório [6]. Neste TCC, propomos fazer um estudo completo, usando métodos analíticos e numéricos, para estudar em detalhe a possibilidade de se criar uma 'borda artificial' através da aplicação de um campo elétrico perpendicular ao eixo do tubo. A ideia é relativamente simples, tendo sido proposta em [7]: a aplicação do campo elétrico, como descrito acima, vai gerar quatro regiões distintas no tubo, duas topologicamente triviais (onde a componente perpendicular do campo é maior do que E_c) e duas topologicamente não triviais (onde é menor do que E_c). As 'fronteiras' entre estas regiões podem apresentar propriedades metálicas e alguma forma de polarização de spin e, como esse estudo ainda não está presente na literatura, é

o que procuramos descobrir.

2 Abstract

Materials like Silicen (hexagonal lattice, similar to graphene, but with atoms of silicon, germanene or stanene) [1] are non-trivial topological insulators. That means that zigzag ribbons of these material shown metalical states at the edge with spin polarization and protected by temporal symmetries inversion [2]. That properties make these systems gain big interest in the potential use on new generation of electronics, named Siltronic [3] [4]. It is known that the application of a perpendicular field over a monolayer of silicene can create a topological phase transition [5], where above a certain value named critical field E_c the material become a trivial insulator, in other words a band-insulator. Moreover, nanotubes of silicene have already been synthesized in the laboratory [6]. In this TCC, we are proposing to make a complete study, using analytical and numerical methods to study in details the possibility to create an ‘artificial boundary’ through the incidence of a perpendicular electrical field. As described above the field will generate four different regions on the tube, two of them topologically trivial and two nontrivial. These ‘edges’ between these two region can be shown metallic properties and some kind of polarization of spin, and as that study isn’t done in literature is what we want to find.

3 Introdução

Os isolantes topológicos [8](IT) capturam a atenção da Física da Matéria Condensada desde 2005 quando foram previstos por Charlie Kane e Eugene Mele[9];[10] e observados posteriormente pelo grupo de pesquisa de Laurens Molenkamp no ano de 2007[11], o material entretanto não foi o ‘grafeno’ (nome recorrente na grande mídia) mas sim os poços quânticos de HgTe/CdTe, que eventualmente tornou-se fundamental para o entendimento de fases topológicas não triviais e interação spin-órbita.

Uma das propriedades mais impressionantes dos isolantes topológicos bidimensionais (2D) é a presença de um estado metálico helicoidal nas bordas, ou seja, a borda de uma fita que seja IT contempla uma corrente elétrica polarizada caso a simetria de inversão temporal não seja quebrada. E isso inicia um possível novo paradigma na Física da Matéria Condensada, pois agora podemos obter novos estados sem quebra espontânea de simetria visto que até então, a existência de diferentes parâmetros de ordem para cada novo estado quântico, com um valor médio finito, só poderia ser obtido com quebra de simetria.

O efeito Hall quântico foi identificado como um efeito em IT não trivial há mais de trinta anos[12], mas o fato de sua observação ser a época ser muito difícil fez dele um caso muito particular e obscureceu o fato de que o conceito ‘fase’ em IT é bem mais abrangente do que se pensava inicialmente. A quantização precisa no efeito Hall para a condutância ocorre pois trata-se de uma invariável topológica ¹ e detalhes microscópicos do material não

¹Na topologia e áreas relacionadas da matemática, uma propriedade topológica ou

interferem em sua manifestação[13].

Como mencionado acima, a proposta inicial de Kane e Mele [9], [10] de descrever uma fase topológica não trivial com spin hall quântico foi frustrada devido a baixa magnitude do efeito spin-órbita no grafeno, um material inovador à época e que apresentava comportamento topológico. O que levou a comunidade a procurar por novos materiais 2d com interação spin-órbita de maior magnitude, para que as propriedades eletrônicas pudessem ser controladas e, que poderiam possuir fases topológicas não triviais a temperaturas próximas a ambiente. A dificuldade experimental sobre o ‘HgTe/CdTe’ deixou claro que ele não era o candidato ideal, assim os grupos de pesquisa procuraram os substitutos naturais do grafeno, como siliceno, estaneno e germameno[14], [15],[7],[5], [16],[1].

invariante topológica é uma propriedade de um espaço topológico que é invariante sob homeomorfismos.

4 Ferramentas para estudar o Siliceno

Aqui serão apresentadas ideias fundamentais para estudar e entender isolantes topológicos, com foco especial no formalismo utilizado durante a pesquisa, o ‘tight-binding’ e no efeito spin-órbita, ambos fundamentais para o entendimento do TCC.

4.1 spin-órbita

A primeira ideia apresentada será o spin-órbita, tema recorrente de reuniões e discussões do grupo. Aqui passaremos brevemente pelos spin-órbita intrínseco[17] e Rashba.

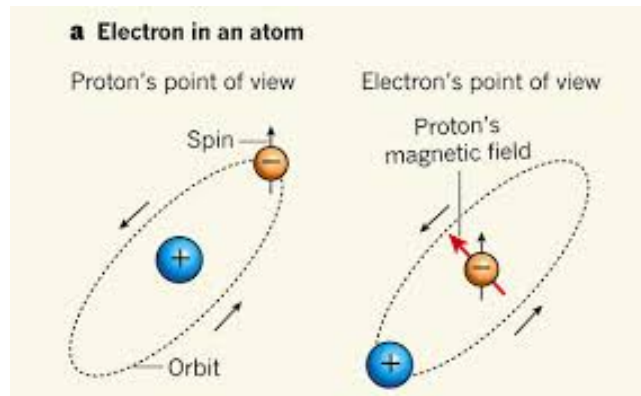


Figura 1: Referenciais diferentes, o primeiro com o próton no centro, e o segundo com o elétron no centro. (Figura adaptada de [17])

4.1.1 Spin-Órbita para o Hidrogênio

É preciso primeiro entender como o movimento que o elétron possui está acoplado com seu spin[17]. Nessa seção faremos uma rápida revisão do tema, para a solução em detalhes ([17] pág 241-242).

Imagine um elétron orbitando um núcleo, do ponto de vista do elétron, o próton é que está em sua órbita (figura 1), a carga positiva circundado o elétron pode ser entendida como uma corrente e, uma corrente circular gera um campo magnético dipolar \vec{B} . Esse campo exercerá torque no elétron através do momento magnético de spin $\vec{\mu}$, tentando alinhá-lo ao campo. O Hamiltoniano para esse caso é bem conhecido de eletromagnetismo [18]:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (1)$$

O campo magnético gerado pelo próton no novo referencial é $B = \frac{\mu_0 I}{2r}$ (μ_0 a permissividade magnética no vácuo, I a corrente elétrica e r a distância entre a fonte da corrente e o ponto do campo elétrico), tomando $I = \frac{e}{T}$ (e é a carga do elétron e T o período para uma volta completa) e $L = \frac{m r^2 \pi}{T}$ (m a massa do elétron) podemos escrever o campo magnético como:

$$\vec{B} = \frac{e \vec{L}}{4\pi t_0 m c^2 r^3}, \quad (2)$$

em que \vec{L} é o momento angular orbital do elétron, t_0 a permeabilidade elétrica e c a velocidade da luz. Agora basta encontrarmos uma expressão conveniente para o momento dipolar magnético do elétron e combinar com a equação 1. Para encontrá-lo consideremos uma carga q girando num anel de raio r que roda com período T , o momento magnético desse sistema é definido como a corrente ($\frac{q}{T}$) vezes a área do anel:

$$\mu = \frac{q \pi r^2}{T}. \quad (3)$$

Agora, se o anel possui massa m seu momento angular é o momento de inércia mr^2 vezes a velocidade angular $\frac{2\pi}{T}$:

$$S = \frac{2\pi r^2 m}{T}. \quad (4)$$

Tomando as equações 3 e 4 chegamos numa expressão compacta para o momento magnético:

$$\vec{\mu} = \frac{q\vec{S}}{2m}. \quad (5)$$

Combinando as expressões para o campo e o momento magnético, chegamos em uma boa e esclarecedora forma para o Hamiltoniano:

$$H = \frac{e^2 \vec{S} \cdot \vec{L}}{4\pi t_0 m^2 c^2 r^3}. \quad (6)$$

Entretanto estes cálculos possuem um problema sério, pois a análise foi feita para um sistema inercial, entretanto o elétron acelera na órbita ao redor do núcleo (conseqüentemente também o próton ao mudarmos nossa referência). Mas felizmente a correção destas considerações equivocadas é conhecida e chamada precessão de Thomas [17] que nesse contexto basta multiplicar a equação obtida por $\frac{1}{2}$:

$$H = \frac{e^2 \vec{S} \cdot \vec{L}}{8\pi t_0 m^2 c^2 r^3}. \quad (7)$$

4.1.2 spin-órbita do Tipo Rashba

Agora será discutido o spin-órbita do tipo Rashba. O acoplamento spin-órbita do tipo Rashba é típico para sistemas com simetria em apenas um dos eixos. Como por exemplo o CdS e o CdSe, também em heteroestruturas onde se desenvolve como resultado de uma quebra de simetria perpendicular à superfície, ou seja, sistemas que não apresentam simetria de inversão (um pequeno resumo sobre simetrias em materiais link). Nesses casos, a relação de dispersão se dá por:

$$t = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \pm \alpha p, \quad (8)$$

onde α é o coeficiente Rashba da interação spin-órbita e p é o momento. O sinal é definido pelo Spin do elétron, uma outra maneira de encarar o mesmo problema é partir da equação de Dirac e chegar no seguinte Hamiltoniano (o processo é bem descrito em [19]):

$$H_{SO} = \frac{\hbar^2 \vec{\sigma}}{4mc^2} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla} V), \quad (9)$$

sendo $\vec{\sigma}$ as matrizes de Pauli e V a função potencial aplicada.

$$H_{SO} = \frac{\hbar^2}{4mc^2} \nabla V_z \cdot (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (10)$$

Importante ressaltar que o coeficiente ‘ α ’ é definido exatamente como o termo de proporcionalidade acima, ou seja:

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{4mc^2} \cdot \frac{\partial V}{\partial z}. \quad (11)$$

Portanto, ao assumirmos que há assimetria no material torna-se possível manipular o Spin com a aplicação de um campo elétrico externo qualquer (pois ele quebra a simetria de reversão temporal). Vemos então que a aplicação de um campo elétrico na direção z gera por efeito relativístico um campo magnético, resultando em um termo equivalente ao do efeito Zeeman (1). Tal campo magnético, ao redor do qual o spin do elétron precessiona serve para controlar o spin através de um campo elétrico externo (efeito que constitui a essência da spintrônica).

4.2 Modelo Tight-Binding

O modelo tight-binding goza de uma facilidade na abstração bem grande, temos uma ‘figura’ das ligações entre elétrons no espaço real, com este modelo assumimos que os elétrons são fortemente ligados ao átomo a que pertencem e fazem fraquíssimas interações com os demais elétrons no sistema (tanto os do próprio átomo quanto de toda rede cristalina). As expressões estão melhor desenvolvidas na referência [20].

Os átomos serão tratados como quase individuais com apenas uma pequena superposição entre suas funções de onda. Começamos com a equação de Schrödinger de uma única partícula em toda a rede:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (12)$$

então assumimos que a função de onda de-localizada da equação acima é aproximadamente igual à combinação linear de funções de onda de átomos isolados com cada um vivendo em um sítio da rede estudada obtendo (em

uma dimensão):

$$\psi(x) = \sum_n^N \alpha_n \phi(x - x_n), \quad (13)$$

onde n representa o sítio para o qual atual, N o número total de sítios, x a posição atual e x_n as posições dos demais sítios. Já que estamos falando de uma rede periódica vale que:

$$x_n = n \cdot a, \quad (14)$$

em que a trata-se de um parâmetro de rede. Utilizando a relação de linearidade acima é válido ressaltar que:

$$x_n \pm x_m = a \cdot m \pm a \cdot n = a \cdot (m \pm n) = a \cdot (n \pm m) = x_{n \pm m}, \quad (15)$$

$$\therefore x_n \pm x_m = x_{n \pm m}. \quad (16)$$

O resultado acima, deixa claro que operações sobre as posições m e n podem ser relacionadas pelos sub-índices, essa propriedade será utilizada ao longo do TCC. A partir das considerações passadas podemos escrever o produto interno como:

$$\int \phi(x - x_n)^* \phi(x - x_m) dx = \delta_{nm}. \quad (17)$$

A função de onda deve seguir o teorema de Bloch, pois uma rede cristalina apresenta potencial periódico, com isso a seguinte relação deve ser válida:

$$\psi(x + x_m) = e^{ikx_m}\psi(x) = \sum_n^N \alpha_n \phi(x - x_n + x_m). \quad (18)$$

Se fizermos agora $s = n - m \implies n = s + m$ e usando as relações de linearidade previamente vistas obtemos nossa função de onda em uma forma mais amigável:

$$\psi(x + x_m) = \sum_s^N \alpha_{s+m} \phi(x - x_s). \quad (19)$$

Da equação acima e do teorema de Bloch é possível estabelecer a relação de recorrência:

$$\alpha_{s+m} = e^{ikx_m} \alpha_s. \quad (20)$$

A solução para o problema acima:

$$\alpha_m = e^{ikx_m} \alpha_0. \quad (21)$$

Encontrar o valor de α_0 é razoavelmente simples, pois basta usar a condição de normalização :

$$\int \psi(x)^* \psi(x) dx = |\alpha_0|^2 \sum_{n,m}^N 1 = |\alpha_0|^2 \cdot N. \quad (22)$$

Basta portanto isolar α_0 :

$$\alpha_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (23)$$

Com todas as considerações necessárias bem estabelecidas, já podemos escrever nossa função de onda de-localizada para um único elétron em toda a rede cristalina:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n^N e^{ikx_n} \phi(x - x_n). \quad (24)$$

Um forma extremamente elegante e compacta que descreve com clareza e precisão nosso objetivo. Mas a beleza e simplicidade da equação acima darão lugar ao nosso novo objetivo, descrever o espectro de energia dessa função de onda, o valor médio do Hamiltoniano é:

$$E = \frac{1}{N} \sum_{n,m}^N \int e^{ik(x_n - x_m)} \phi(x - x_m)^* \hat{H} \phi(x - x_n) dx. \quad (25)$$

Definimos uma grandeza chamada energia de ligação ou ‘hopping energy’ como:

$$t_{nm} = \int \phi(x - x_m)^* \hat{H} \phi(x - x_n) dx. \quad (26)$$

O ‘hopping’ possui papel fundamental ao longo das discussões e, definir uma forma reduzida será extremamente útil em toda a notação. É válido ressaltar também que :

$$t_{nm} = t(x_n - x_m) = t_{n-m}. \quad (27)$$

Observa-se que a energia de ligação depende da distância entre os sítio na rede estudada (para essa afirmação estamos supondo que há apenas um tipo de átomo e que as ligações são isotrópicas); o Hamiltoniano toma agora uma forma mais simples:

$$E = \int \psi(x)^* \hat{H} \psi(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{n,m}^N t_{n-m} e^{ik(x_n - x_m)}. \quad (28)$$

Escrevendo $\delta = n - m \implies n = \delta + m$ temos:

$$E = \frac{1}{N} \sum_{\delta, m}^N t_{\delta} e^{ik\delta} = \sum_{\delta}^N t_{\delta} e^{ik\delta}. \quad (29)$$

Com a expressão para as energias bem definida precisamos estabelecer limites para a soma, ao fazermos $\delta = \pm a$ em que ‘a’ é o parâmetro de rede:

$$t_{+a} = t_{-a} = t_0. \quad (30)$$

Em que t é a energia de ligação, dessa forma encontramos uma expressão simples para a energia:

$$E = 2t_0 \cos(ka). \quad (31)$$

Com a dedução acima para o caso mais simples (apenas uma dimensão) o método de ‘tight-binding’ fica bem estabelecido, os casos mais gerais (duas e três dimensões) são similares e podem ser encontrados em [21] [22].

4.3 Álgebra dos Operadores de Criação e Aniquilação

Aqui haverá uma breve apresentação dos operadores de criação e aniquilação, pois os Hamiltonianos presentes no trabalho estão escritos sobre este formalismo. Tanto na literatura quanto no TCC os operadores de criação e aniquilação serão c_{α}^{\dagger} e c_{α} respectivamente.

Bem, para férmions valem as seguintes propriedades:

$$[c_{in}, c_{jm}^{\dagger}]_{+} = \delta_{ij} \delta_{nm} \implies c_{in} c_{jm}^{\dagger} = \delta_{ij} \delta_{nm} - c_{jm}^{\dagger} c_{in}, \quad (32)$$

$$[c_{in}, c_{jm}]_+ = 0 \implies c_{in}c_{jm} = -c_{jm}c_{in}, \quad (33)$$

$$[c_{in}^\dagger, c_{jm}^\dagger]_+ = 0 \implies c_{in}^\dagger c_{jm}^\dagger = -c_{jm}^\dagger c_{in}^\dagger, \quad (34)$$

onde os índices i e j são os sítios e n e m os spins. Re-escrevendo estados quânticos com os operadores e considerando $|0\rangle$ o vácuo (todos os sítios vazios).

$$c_{jm}^\dagger |0\rangle = |jm\rangle, \quad (35)$$

$$c_{jm} |jm\rangle = |0\rangle, \quad (36)$$

$$|N \uparrow\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{3\uparrow}^\dagger \dots c_{N\uparrow}^\dagger |0\rangle = \prod_i c_{i\uparrow}^\dagger |0\rangle. \quad (37)$$

Esta breve introdução é suficiente para a leitura de algumas das equações a seguir. Caso não tenha ficado realmente claro o leitor pode recorrer às referências [23]; [24]. A seção ficou breve pois trata-se apenas de um formalismo matemático mas a física por trás torna-se intuitiva com alguns exemplos, para mais detalhes recomendo link, onde o autor passa da primeira para a segunda quantização em detalhes.

4.4 Nosso Hamiltoniano Efetivo

Vamos utilizar as ferramentas mostradas ao longo dessa seção para encontrar o Hamiltoniano efetivo uma rede de carbonos hexagonal com apenas duas direções.

4.4.1 Vetores da Base

Será fundamental ao longo de toda a explicação saber quais são os vetores da base na rede triangular, apresentados abaixo:

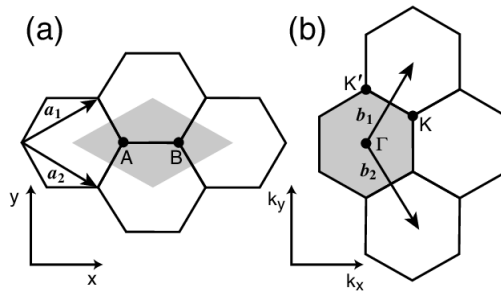


Figura 2: (a) \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores da base no espaço real, (b) \vec{b}_1 e \vec{b}_2 os vetores no espaço recíproco bi-dimensional. Para uma discussão mais robusta sobre os vetores da base real e recíproca, consulte [25].

Matematicamente os vetores do espaço real são dados por:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}).\end{aligned}\tag{38}$$

Já no espaço recíproco:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} + \frac{\hat{y}}{\sqrt{3}} \right), \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{\hat{y}}{\sqrt{3}} \right).\end{aligned}\tag{39}$$

4.4.2 O Hamiltoniano Tight Binding

O Tight Binding (TB) já foi apresentado, aqui mostraremos sua utilização para encontrar o modelo efetivo. O Hamiltoniano por TB é dado por:

$$H = -t \sum_{\langle i\alpha j\beta \rangle} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + h.c.,\tag{40}$$

onde t é o termo de hopping, i e j referem-se aos sítios (ou seja, $c_i^\dagger \alpha$ está criando um estado no sítio i com spin α), α e β o estado do spin eletrônico e ‘ $h.c.$ ’ é o hermitiano conjugado da matriz ($h.c. = \sum_{\langle i\alpha j\beta \rangle} c_{i\alpha} c_{j\beta}^\dagger$). O somatório percorre todos os sítios mas apenas entre primeiros vizinhos. Reescrevendo os operadores de segunda quantização (usando a transformada de Fourier) e tomando explícita a soma apenas entre primeiros vizinhos o Hamiltoniano fica:

$$H = -\frac{t}{2} \sum_k [2c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} (1 + e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{a}_2}) + h.c].\tag{41}$$

Para simplificar a expressão podemos utilizar o espinor de Nambu onde $1 = \uparrow$ e $2 = \downarrow$:

$$\begin{aligned}\psi_k^\dagger &= [c_{k1}^\dagger \ c_{k2}^\dagger], \\ \psi_k &= [c_{k1} \ c_{k2}]^T.\end{aligned}\tag{42}$$

Podemos ainda escrever:

$$d^\pm(k) = -t(1 + e^{\pm i \vec{k} \vec{a}_1} + e^{\pm i \vec{k} \vec{a}_2}).\tag{43}$$

Por último, adicionamos um termo diagonal:

$$\sum_{k\alpha} m_\alpha c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha},\tag{44}$$

onde $m_\alpha = (-1)^\alpha m$. Com as alterações acima temos:

$$\hat{H} = \psi_k^\dagger \bar{H} \psi_k = (c_{k1}^\dagger \ c_{k2}^\dagger) \begin{pmatrix} +m & d^-(k) \\ d^+(k) & -m \end{pmatrix} (c_{k1} \ c_{k2})^T.\tag{45}$$

Associando a forma acima com as matrizes de Pauli é possível definirmos duas novas entidades:

$$\begin{aligned}d^x(k) &= \frac{1}{2}(d^+ + d^-) = -t(1 + \cos(ka_1) + \cos(ka_2)), \\ d^y(k) &= \frac{1}{2}(d^+ - d^-) = -t(\sin(ka_1) + \sin(ka_2)).\end{aligned}\tag{46}$$

O que nos leva a uma forma simples para o Hamiltoniano:

$$H = \sum_k \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}.\tag{47}$$

De modo que $\vec{d} = (d^x, d^y, d^z)$ e $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Com essa forma do Hamiltoniano fica fácil encontrarmos os autovalores:

$$\hat{H}(\vec{k}) = \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \implies (d_x^2 + d_y^2 + d_z^2)_{2 \times 2} = \vec{d} \cdot \vec{d}, \quad (48)$$

portanto, os autovalores:

$$t_{\pm}(\vec{k}) = \pm \sqrt{\vec{d} \cdot \vec{d}}. \quad (49)$$

Agora com a expressão dos autovalores é possível encontrar para quais valores de \vec{k} eles se anulam. Esse resultado sairá de uma álgebra ligeiramente tediosa então não o colocarei no TCC, mas o review [26] faz com detalhes e encontra:

$$\begin{aligned} \vec{K} &= \left(\frac{4\pi}{3a}, 0 \right), \\ \vec{K}' &= \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \right), \end{aligned} \quad (50)$$

onde \vec{K} e \vec{K}' representam pontos onde essa energia vai a zero. Com os dois vetores, podemos expandir a relação de auto valores próximo ao ponto onde vale zero.

Os resultados futuros utilizarão a seguinte notação:

$$\begin{aligned} \vec{k}' &= \vec{k} - \vec{K}, \\ k'_x &= k_x - \frac{4\pi}{3a}, \\ k'_y &= k_y. \end{aligned} \quad (51)$$

Voltando ao problema, novamente trata-se de uma álgebra trabalhosa que nos leva ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} d^x(\vec{k}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2}tk'_x, \\ d^y(-\vec{k}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2}tk'_y. \end{aligned} \tag{52}$$

Analogamente podemos fazer com o ponto K' e encontrar:

$$\begin{aligned} d^x_{\pm} &= \pm vk'_x, \\ d^y_{\pm} &= vk'_y, \end{aligned} \tag{53}$$

onde '+' $\rightarrow K$ e '-' $\rightarrow K'$, o que nos leva a forma final do Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H_+(\vec{k}) &= v(k_x\sigma^x + k_y\sigma^y) + m\sigma^y, \\ H_-(-\vec{k}) &= v(k_x\sigma^x + k_y\sigma^y) + m\sigma^y. \end{aligned} \tag{54}$$

4.4.3 Modelo de Kane-Mele

Agora será incluída a Degenerescência de Vale que ocorre quando o mínimo de banda de condução possui um vetor fora do centro da zona de Brillouin, assim haverá dois vales de energia mínima em K e K' no espaço recíproco.

Podemos então pensar num novo conjunto de matrizes de Dirac:

$$\sigma^i \rightarrow \text{Grau de liberdade da sub rede.} \quad (55)$$

Tomando os primeiros termos do Hamiltoniano (54) é possível observar que eles têm forma:

$$M_1 = \begin{pmatrix} |A+\rangle & |B+\rangle \\ 0 & vk_x \\ vk_x & 0 \end{pmatrix},$$

$$M_2 = \begin{pmatrix} |A-\rangle & |B-\rangle \\ 0 & -vk_x \\ -vk_x & 0 \end{pmatrix},$$

onde as matrizes M_1 e M_2 são definidas pelo produto interno dos estados em $A\pm$ e $B\pm$ os sinais referem-se aos graus de liberdade de vale, então na realidade o que temos é um espaço de Hilbert com quatro dimensões, ou seja, uma matriz 4×4 da forma:

$$M = M_1 \otimes M_2 = \begin{pmatrix} |A+\rangle & |B+\rangle & |A-\rangle & |B-\rangle \\ 0 & vk_x & 0 & 0 \\ vk_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -vk_x \\ 0 & 0 & -vk_x & 0 \end{pmatrix}$$

Embora seja conveniente e comum ocultar o produto tensorial, durante o restante do capítulo continuaremos adotando a notação extensa. Com as conjecturas acima, nosso Hamiltoniano poderá ser reescrito em função de Υ e σ :

$$H(\vec{k}) = v(k_x \sigma^z \sigma^x + k_y \sigma^0 \sigma^y) + m \sigma^x \sigma^z. \quad (56)$$

4.4.4 Simetria de Paridade

Agora que temos uma expressão matricial bem definida e simples para o Hamiltoniano, analisaremos quais simetrias ele apresenta. Começando pela simetria de paridade que troca as sub redes $A \iff B$ e $(x, y, z) \iff (-x, -y, -z)$ a notação usual é chamar a operação de paridade de \mathbf{P} .

É importante mostrar que o momento terá seu sinal trocado:

$$\begin{aligned} p_j &= -\hbar i \frac{\partial}{\partial j}, \\ \therefore p_{-j} &= -\hbar i \frac{\partial}{\partial (-j)} = -p_j. \end{aligned} \quad (57)$$

Já as matrizes de Pauli:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} |A\rangle & |B\rangle \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \implies \mathbf{P} \sigma_x \mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} |B\rangle & |A\rangle \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} |A\rangle & |B\rangle \\ 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \implies \mathbf{P} \sigma_y \mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} |B\rangle & |A\rangle \\ 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (58)$$

Sabendo que $\mathbf{P}p_i\mathbf{P}^{-1} \implies -p_i$, $\mathbf{P}\sigma_x\mathbf{P}^{-1} = \sigma_x$ e $\mathbf{P}\sigma_y\mathbf{P}^{-1} = -\sigma_y$ aplicamos o operador no Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}\mathbf{P}H(\vec{k})\mathbf{P}^{-1} &= v[(-k_x)(\Upsilon_z)\sigma^x + (-k_y)\Upsilon(-\sigma^y)] \\ &= v[k_x\Upsilon_z\sigma^x + k_y\Upsilon_0\sigma^y] = H(\vec{k}).\end{aligned}\tag{59}$$

Disso temos que $\mathbf{P}H = H\mathbf{P}$ logo $[P, H(\vec{k})] = 0$. Ou seja o Hamiltoniano possui simetria de paridade, pois comuta com o operador.

4.4.5 Simetria de Reversibilidade Temporal

Como o próprio nome já deixa explícito, o operador de simetria temporal troca t por $-t'$ e será representado por \mathbf{T} . Em termos práticos o operador faz:

$$\begin{aligned}\vec{k} &\rightarrow -\vec{k}, \\ \sigma_x &\rightarrow \sigma_x, \\ \sigma_y &\rightarrow -\sigma_y, \\ \sigma_z &\rightarrow \sigma_z, \\ \vec{S} &\rightarrow -\vec{S},\end{aligned}\tag{60}$$

onde S é o momento angular de spin. Apliquemos então a simetria na forma do Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}H(\vec{k})\mathbf{T}^{-1} &= v[(-k_x)(-\Upsilon^z)\sigma^x + (-k_y)\Upsilon^0(-\sigma^y)] \\
&= v[k_x\Upsilon^z\sigma^x + k_y\Upsilon^0\sigma^y] = H(\vec{k}).
\end{aligned} \tag{61}$$

O que nos leva ao importante resultado que $[\mathbf{T}, H(\vec{k})] = 0$, ou seja, o Hamiltoniano apresenta também simetria de reversibilidade temporal, no contexto de isolantes topológico é uma simetria fundamental, pois ela torna possível que estados quânticos de Hall, primordiais para a condução polarizada de spin. Para uma discussão mais completa, veja [27], [2] e [28].

4.5 Propriedades e Características dos Nanotubos de Grafeno

Nesta seção haverá uma discussão breve sobre nanotubos de grafeno que tratam-se de mono camadas de carbono de formato cilíndrico, com diâmetro na casa dos nanômetros. Sua dimensão e perfeição estrutural são algumas das características que justificam o porquê de serem objetos tão estudados.

Como um nanotubo é obtido enrolando uma folha de grafeno é conveniente descrevê-lo a partir dos vetores da base do grafeno. Essa estrutura pode ser expressada pelo vetor de quiralidade C_h (vetor para localização geométrica escrito sobre as bases da rede cristalina, ele é especialmente útil para distinguir nanotubos zigue-zague, armchair e quiral) como na figura 3 :

$$C_h = na_1 + ma_2 . \tag{62}$$

Como o vetor quiral nos permite encontrar a circunferência do tubo [25], logicamente também nos fornece o diâmetro através da expressão:

$$d_t = \frac{|C_h|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (63)$$

em que a é a constante de rede do tipo ‘honeycomb’: $a \approx 2.46 \text{ \AA}$. O vetor quiral também nos permite encontrar o ângulo quiral θ entre C_h e a_1 . Para isso podemos fazer como indicado na 3.

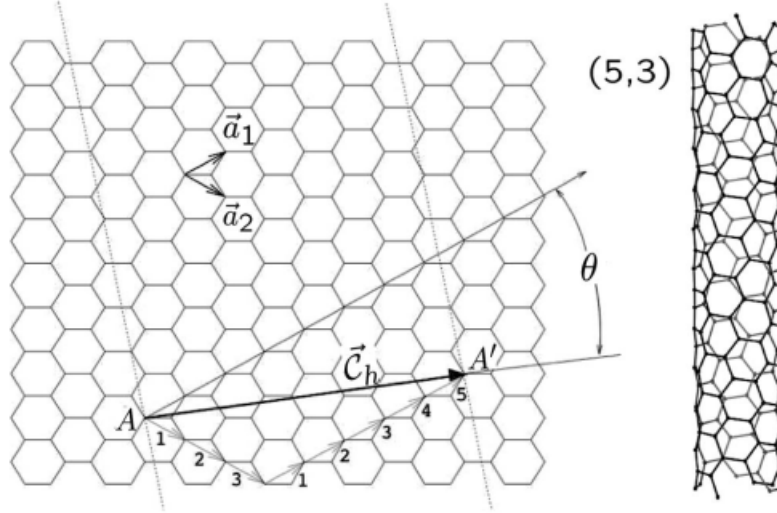


Figura 3: Rede de grafeno do tipo ‘honeycomb’ com vetores da base ‘ a_1 ’ e ‘ a_2 ’. O vetor quiral no caso acima é $C_h = 5a_1 + 3a_2$. O vetor perpendicular a ‘ C_h ’ é o eixo do tubo. Já o ângulo quiral é definido entre ‘ C_h ’ e ‘ a_1 ’ na direção da rede zigue zague. O tubo a direita é o resultado do vetor quiral apresentado (5,3). Figura adaptada de [25].

O ângulo é então:

$$\cos(\theta) = \frac{C_h \cdot a_1}{|C_h||a_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}. \quad (64)$$

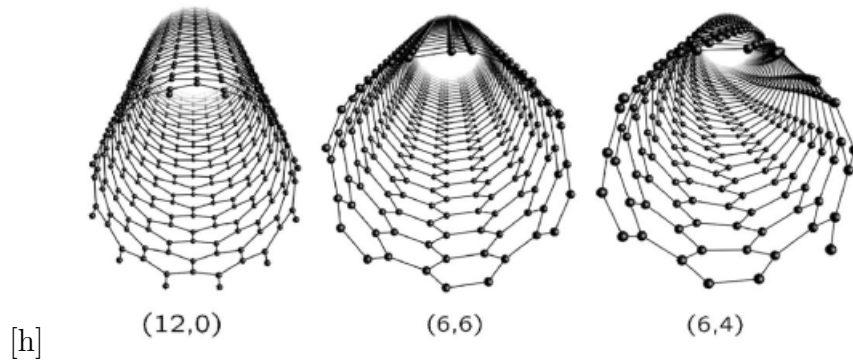


Figura 4: Nanotubo do tipo (12,0) zigzag, (6,6) armchair e (6,4) quiral. Figura adaptada de [25].

O módulo de ' θ ' deve estar no intervalo entre 0 e 30° . O ângulo quiral também diz respeito ao ângulo entre os hexágonos e a direção do eixo do nanotubo. Nanotubos do tipo (n,0) são chamados de nanotubos 'zigzag', pois exibem um zigue-zague ao longo da circunferência; nanotubos do tipo (n,n) são chamados de nanotubos 'armchair'. Ambos 'zigzag' e 'armchair' possuem estrutura não-quirais. Por último, temos os nanotubos quirais com $(n, m \neq n \neq 0)$.

A geometria do grafeno na rede determina não só o diâmetro, como também as células unitárias, número de átomos de carbono e, o mais importante para essa pesquisa, a estrutura de bandas. Nosso objeto de interesse são os nanotubos do tipo 'armchair', pois apresentam comportamento metálico naturalmente.

5 Entender o Campo Elétrico em Nanotubos de Siliceno

5.1 Motivação para estudar o Siliceno

Materiais como o Siliceno (isolantes topológicos) tiveram grande ascensão nos últimos anos e um dos principais motivos é o acúmulo de décadas em que a indústria de microeletrônica tem utilizado o Silício para a produção de dispositivos, ou seja o investimento e conhecimento acumulados sobre o silício nesse tempo são importantes propulsores para a continuação do uso do mesmo. Ainda, Isolantes Topológicos, os quais foram peça central para o Prêmio Nobel de 2016 ² é uma das áreas mais ativas de pesquisa em física da Matéria Condensada [8] [29] [19] [1] [10] [30].

5.2 Modelo do Siliceno com Tigh-Binding Incluindo Acoplamento spin-órbita

O Hamiltoniano ‘single-particle’ para um isolante topológico periódico de duas dimensões, sob o formalismo tight-binding e influência de um campo elétrico externo é apropriadamente escrito para o siliceno como [1]:

$$H_{\text{band}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i \frac{\lambda_{\text{SO}}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \sigma} \sigma \nu_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \ell e \sum_{i,\sigma} \zeta^i E_z^i c_{\sigma,i}^\dagger c_{\sigma,i} + h.c., \quad (65)$$

²<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2016/advanced-information/>

em que $c_{i\sigma}^\dagger$ cria um elétron no sítio i com spin σ ($\sigma = \uparrow\downarrow$ quando for usado como sub-índice e $\sigma = \pm$ durante equações); já $\langle i, j \rangle$ percorre os sítios de primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ percorre os sítios de segundos vizinhos; t o termo de hopping. O primeiro termo descreve ‘hoppings’ de primeiros vizinhos; o segundo diz respeito ao acoplamento spin-órbita (λ_{SO}), com $\nu_{ij} = 1$ se os segundos vizinhos possuem ‘hopping’ no sentido anti-horário e $\nu_{ij} = -1$ caso possuam hopping em sentido horário; por fim, o terceiro termo existe devido à energia potencial entre as duas sub-redes gerada pelo campo elétrico perpendicular à folha de siliceno. O fator $\zeta = \pm 1$ tem valor positivo para a sub-rede A e negativo para B ; a separação espacial entre as sub-redes é 2ℓ com $\ell = 0.33\text{\AA}$ para o siliceno; E_z é o módulo do campo elétrico perpendicular à folha e, a diferença de energia potencial gerada entre as duas sub-redes é dada por $e\Delta V = 2e\ell E_z$, em que $\vec{\nabla}V = -E_z\hat{z}$, e ‘ e ’ é a carga do elétron. A tabela a seguir apresenta os parâmetros de interesse para o grafeno, siliceno, germaneno e estaneno.

	$t(\text{eV})$	v_F	$a(\text{\AA})$	λ_{SO}	λ_R	θ
Grafeno	2.8	9.8	2.46	10^{-3}	0	90
Siliceno	1.6	5.5	3.86	3.9	0.7	101.7
Germaneno	1.3	4.6	4.02	43	10.7	106.5
Staneno	1.3	4.9	4.70	100	9.5	107.1

Tabela 1: Os parâmetros característicos para grafeno, siliceno, germaneno, e estaneno. A velocidade de Fermi v_F está em unidades de 10^5m/s , λ_{SO} e λ_R (spin-órbita Rashba) em meV. θ é o ângulo de ‘buckling’.

5.3 Estrutura de Bandas de Nanofitas Zigue-Zague

A figura 5(a) apresenta a estrutura de bandas obtida para H_{band} em uma estrutura de banda de nano fitas em zigue-zague com condições de contorno periódicas (CCP) na direção x e condições de contorno abertas (CCA) na direção y . O parâmetro de acoplamento spin-órbita utilizado foi $\lambda_{SO} = 0.1$ para uma fita com ‘80’ sítios na direção y . Cada banda é duplamente degenerada, além da degenerescência de Kramer $E(k_x) = E(-k_x)$ e, o espectro de energia possui simetria partícula-buraco em torno de $E = 0$. Na figura 5(b) há um zoom da parte tracejada em vermelho mostrada no painel (a) com foco nas bandas que conectam as bandas de valência e condução. Estas quatro bandas possuem estados helicoidais de borda³ (dois em cada uma). O painel 5(c) mostra exatamente a mesma ampliação, mas com $\lambda_{SO} = 0$ (este caso é bem apropriado para o grafeno), mostrando as bandas planas associadas aos estados de borda presentes na estrutura de bandas do grafeno (para mais detalhes [31]).

Na Fig. 5(d) vemos um gráfico do módulo quadrado dos auto-vetores, para cada sítio, onde os estados de borda estão localizados simetricamente ao redor de $k_x = \pi$, i.e., $k_{x1} = \pi - \delta$ e $k_{x2} = \pi + \delta \equiv -2\pi + k_{x2} = k_{x1}$. Note que k_{x1} e k_{x2} são momentos reversos no tempo, um indicativo de propagação em direções opostas. A posição de k_{x1} e k_{x2} e os estados de borda associados são esquematicamente apresentados no painel (b). Os resultados são para $\lambda_{SO} = 0.1$ e $\delta = \frac{\pi}{64}$. Para uma fita com largura de $N=80$ sítios, cada estado das 160 bandas (incluindo spin) para um valor arbitrário de k_x pode ser

³Estados localizados com helicidade bem definida, de maneira resumida, helicidade é a projeção do spin sobre o momento.

escrito como:

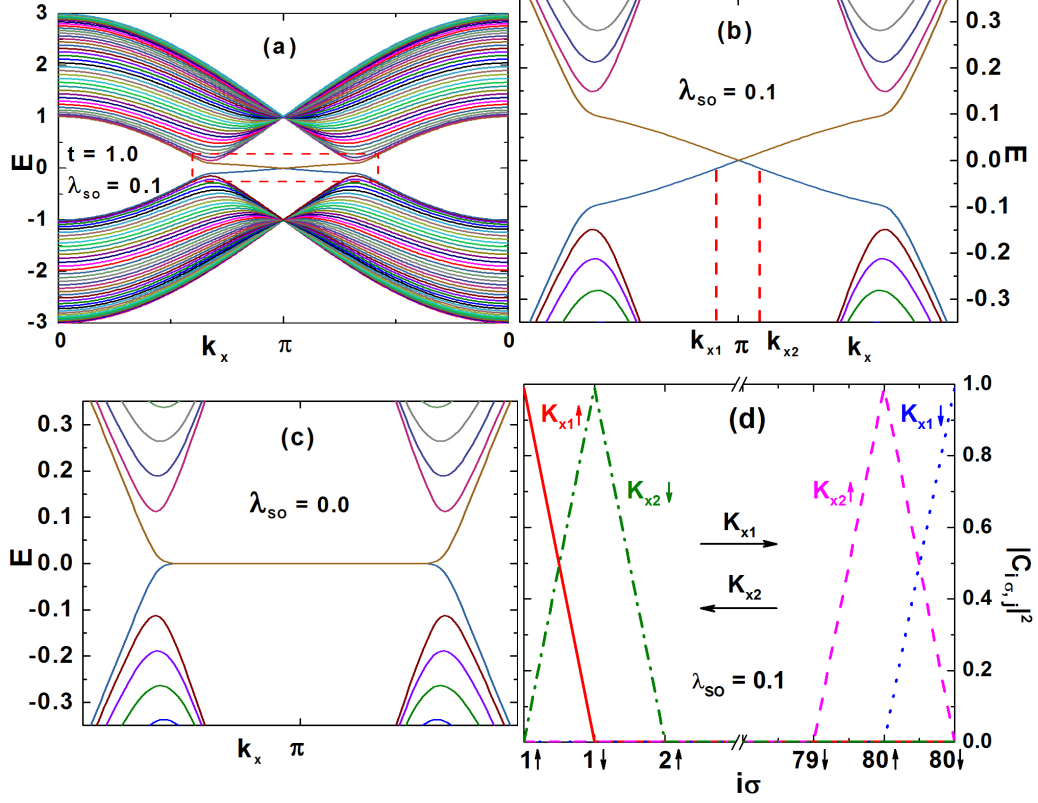


Figura 5: (a) O espectro de energia de uma nano-fita em zigue-zague do estaneno para $\lambda_{SO} = 0.1$. (b) Zoom no tracejado vermelho do painel (a) mostrando detalhes da dispersão de energia nos estados de borda. (c) Similar ao painel (b), mas para $\lambda_{SO} = 0.0$, o que é apropriado ao grafeno. (d) Valor de $|C_{i\sigma}|^2$ para os quatro estados metálicos associados aos vetores de onda k_{x1} e k_{x2} no painel (b). Note que, como discutido com mais detalhes no texto, eles estão localizados exclusivamente nos sítios de crista, e os estados com diferentes polarizações se propagam em direções opostas em cada borda.

$$|E_j(k_x)\rangle = \sum_{i,\sigma} C_{i\sigma j}(k_x) |i\sigma\rangle, \quad (66)$$

onde $i \in [1, 80]$ percorre os sítios na direção y , $\sigma = \uparrow\downarrow$ indica o spin, $E_j(k_x)$ para $j \in [1, 160]$ corre por todas as energias dos auto-estados para um valor

específico de k_x e, por último, $|i\sigma\rangle$ é um estado orbital localizado no sítio i com spin σ . Assumindo $k_x = k_{x1}, k_{x2}$ como definidos anteriormente e os valores de j correspondendo às bandas duplamente degeneradas conectando as bandas de valência e condução ($j=79,80,81$ e 82 , i.e, os quatro estados de borda), nós graficamos $|C_{i\sigma,j}(k_x)|^2$ para cada sítio $i\sigma$. Na realidade, foram plotados apenas os sítios de borda, pois todos os demais coeficientes são nulos. Portanto, estes estados de borda helicoidais são muito bem localizados, propagando-se através dos sítios de crista, apresentando o fenômeno característico de ‘locking’ do spin com o momento linear, o qual está associado à fase topológica não trivial criada pelo acoplamento spin-órbita. Vale complementar que folhas mais estreitas possuem estados de borda menos localizados, a localização varia levemente com k_x quando nos afastamos de $k_x = \pi$, e os estados tornam-se descontínuos e deslocalizados, tornando-se estados de ‘bulk’ uma vez que estas duas bandas de borda se fundem com as bandas de condução ou de valência.

5.4 Controlando Propriedades Topológicas com um Campo Elétrico

É bem conhecido [8] que os IT podem experimentar transição de fase topológica apenas quando o gap na sua banda se fecha. Através da aplicação de um campo elétrico perpendicular à fita de siliceno (penúltimo termo de 65), um potencial é criado (como descrito acima); em virtude deste potencial o gap da banda tende a decrescer quando o campo é ligado. Para o valor crítico $E_c = \frac{\lambda_{SO}}{e\ell}$ (veja na Figura. 6) o gap se fecha. Para $|E_z| > E_c$ o gap é aberto

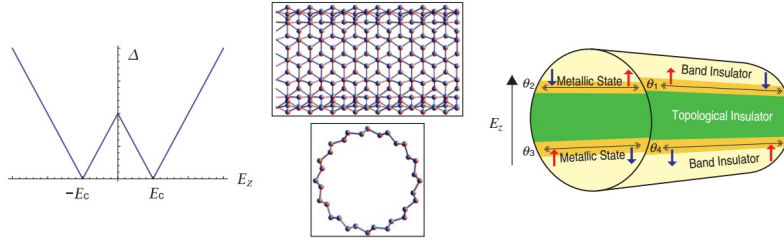


Figura 6: Esquerda: Variação do gap Δ com a aplicação de um campo elétrico perpendicular ao plano do siliceno. Para $|E_z| < E_c$ o isolante é topologicamente não-trivial enquanto que para $|E_z| > E_c$ ele se torna um isolante de banda trivial. Centro: (superior) Nanotubo de siliceno obtido ligando as pontas; (inferior) curva de nível do nanotubo. Direita: Representação esquemática do efeito do campo elétrico. As partes superiores e inferiores do tubo se tornam topologicamente triviais (amarelo), já as laterais continuam não-triviais (verde). É esperado que a parede de domínio formada entre as duas regiões topologicamente distintas possua um estado de borda protegido por simetria de reversão temporal com polarização de spin fixada pelo momento linear, como consequência da interação spin-órbita.

novamente, entretanto agora trata-se de um isolante de banda trivial, ou seja, perdeu suas propriedades topológicas não-triviais. Mais especificamente, um siliceno no qual um campo E_z de alta magnitude é aplicado não possui mais estados de borda com proteção-reversa-temporal-spin-polarizada.

6 Resultados

Nesta seção serão apresentados os resultados calculados computacionalmente utilizando a equação (65). O código que gerou esses resultados foi escrito em python e pode ser encontrado em [32].

6.1 Motivação para o estudo de Nanotubos de Siliceno sob campo elétrico

Desde a primeira observação de estados helicais, na borda de poços quânticos de CdTe/HgTe [11], que se tem feito propostas de criação de bordas ‘suaves’ (livres de defeitos) nas paredes de domínio que devem existir entre regiões topologicamente distintas de um sistema bidimensional. A motivação para tais propostas é a expectativa de que os estados helicais previstos em tais paredes de domínio sofram menos retroespalhamento, que degrada as propriedades helicais dos canais condutores. Por exemplo, estados metálicos topológicos foram recentemente observados [33] em bicamadas de grafeno onde campos elétricos inhomogêneos foram criados através de uma geometria tipo ‘split-gate’ (veja Fig. 1(a) da Ref. [33]). Tais campos elétricos criam duas regiões topologicamente distintas separadas por uma parede de domínio onde ocorre a mudança do invariante topológico, forçando o fechamento do gap de energia na parede de domínio e o surgimento de canais condutores helicais, que, a princípio, podem ser usados em dispositivos de spintrônica. Canais topológicos também foram observados em bicamadas de grafeno dobradas [34], como proposto teoricamente em 2012 [35]. Uma proposta teórica relacio-

nada, envolvendo um sistema bidimensional de siliceno pode ser encontrada na Ref. [36]. Na proposta de Ezawa [37], que motiva o trabalho aqui apresentado (e já brevemente descrita no painel direito da Fig. 6), o campo elétrico é homogêneo e é a curvatura do nanotubo de siliceno que gera as regiões topologicamente distintas no nanotubo: as duas regiões onde o campo é majoritariamente perpendicular à superfície do nanotubo sofrem uma transição de fase topológica e se tornam topologicamente triviais, enquanto as regiões adjacentes, onde o campo é majoritariamente paralelo à superfície do nanotubo, se mantêm não-triviais, criando assim as quatro paredes de domínio que contém os canais condutores helicais. Propostas semelhantes em nanotubos de carbono podem ser encontradas nas Refs. [38, 39]. Este TCC visa fazer uma análise numérica da proposta de Ezawa, que foi originariamente estudada apenas analiticamente [37]. Algumas das vantagens de uma análise numérica podem ser brevemente resumidas: (i) O modelo efetivo usado por Ezawa não permitia o estudo da dependência do campo elétrico crítico E_c (definido como o campo para o qual o gap da estrutura de bandas do nanotubo se fecha) com o diâmetro D do nanotubo. Nossa análise mostra que há uma dependência bastante forte de E_c com D (veja Fig. 9). (ii) O modelo efetivo não permitia a análise detalhada da evolução dos estados com o campo elétrico. Nossa análise numérica revelou um comportamento bastante rico da evolução dos estados de vale até se tornarem estados helicoidais alojados nas paredes de domínio, como discutido abaixo (Fig. 11). (iii)

6.2 Resultados para o nanotubo de siliceno

Aqui entenderemos o comportamento do nanotubo conforme variamos seu tamanho e o campo elétrico. O nanotubo com spin-órbita e campo elétrico nulos possuirá gap igual a zero, pois já é bastante conhecido que um nanotubo de carbono (similar ao nanotubo de siliceno, mas sem spin-órbita) do tipo armchair é metálico [40]. Ao introduzirmos a interação spin-órbita (substituindo carbono por silício) temos um isolante topológico, ou seja, um gap finito (igual a $2\lambda_{SO}$).

Antes de apresentarmos os resultados para o nanotubo a campo finito, devemos especificar claramente qual a geometria do campo elétrico para a qual apresentaremos os resultados numéricos. Tomando θ_i como sendo a coordenada polar dos átomos de silício ao redor da circunferência do nanotubo, e assumindo que $\theta_i = 0$ corresponde ao topo do nanotubo e $\theta_i = \pi$ à sua parte inferior, usamos $\vec{E}_i = \alpha E \cos \theta_i \hat{r}$ para a componente radial do campo elétrico, sendo $\alpha = +$ no primeiro e no quarto quadrantes e $\alpha = -$ no segundo e no terceiro quadrantes, de maneira que o campo radial aponta para dentro do tubo na sua parte inferior e para fora do mesmo na sua parte superior (veja Fig. 7).

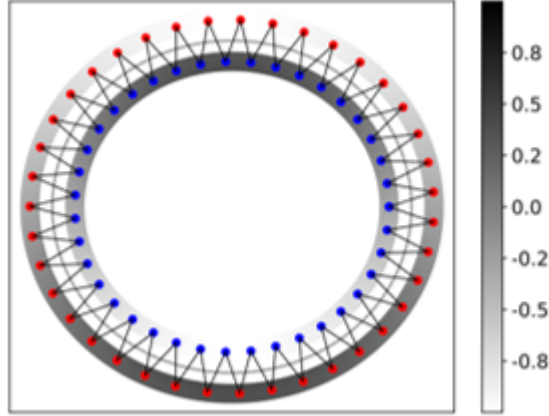


Figura 7: Modelo proposto, onde as sub-redes A e B são diferenciadas pelas cores vermelho e azul. O gradiente ao fundo das sub-redes apresenta a intensidade do potencial eletrostático gerado com o referencial ($V = 0$) entre as duas sub-redes.

Conforme aumentamos o campo elétrico o gap começa a se fechar e para um certo campo crítico E_c o gap se fecha completamente. Foi constatado que esse campo é dependente do raio do nanotubo, veja Fig. 8. Esse comportamento é contrário ao proposto na Ref. [5], onde se considerou o campo crítico como sendo independente do diâmetro D do nanotubo e igual ao campo crítico para uma nanofita $E_c = 2\lambda_{SO}$.

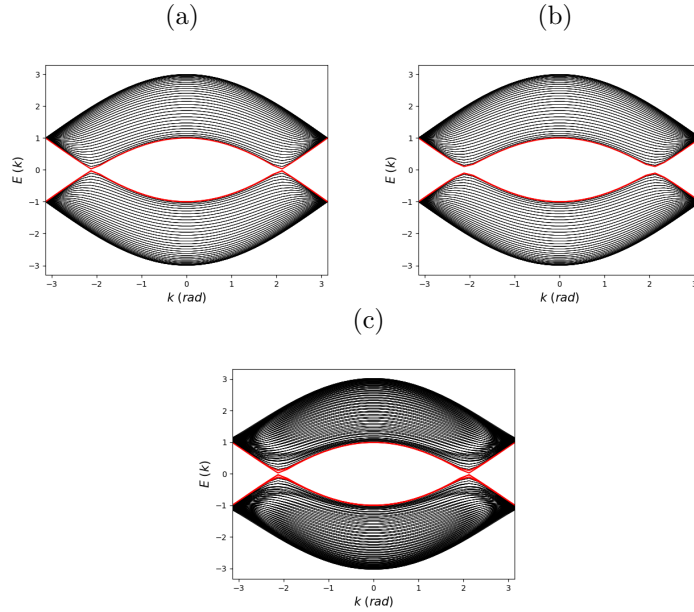


Figura 8: Estrutura de bandas para nanotubo armchair (32,32), ou seja, com 32 silícios em sua seção reta, para valores diferentes de spin-órbita e campo elétrico. (a) Tanto spin-órbita quanto campo elétrico são nulos, portanto o nanotubo é metálico (gap nulo) e a condução de carga ocorre através da seção reta toda do nanotubo; (b) $\lambda_{SO} = 0.1$ e campo nulo, portanto o nanotubo é um Isolante Topológico com gap $\Delta = 2\lambda_{SO} = 0.2$; (c) $\lambda_{SO} = 0.1$ e $E = 1.0$, onde o nanotubo está sofrendo uma transição de fase topológica, onde a condução de carga, através da seção reta toda do nanotubo [painel (a)], aqui vai ser substituída por canais helicoidais que vão se alojar ao longo das paredes de domínio que estão se formando nas laterais do nanotubo (evolução parcialmente mostrada na Fig. 11).

6.2.1 Dependência do gap com diâmetro do nanotubo

Agora que o comportamento foi avistado, é importante salientar a importância da biblioteca ‘gmp’ para obtenção dos valores de gap que extrapolaram a precisão do computador. Para campos próximos ao campo crítico os valores retornados pelas subrotinas padrões claramente mostravam perda de precisão numérica, de modo que o pacote se fez necessário.

Na Fig. 9(a) vemos a evolução do campo crítico E_c (aqui definido como

o campo elétrico necessário para que o gap atinja o valor $\Delta = 10^{-8}$) com o diâmetro do nanotubo. A forte dependência de E_c com D é evidente. O inset do painel (a) mostra a estrutura de bandas para um nanotubo (20,20), ou seja, com $n = 20$, para $E = E_c$. Já a Fig. 9(b) mostra um zoom da estrutura de bandas do nanotubo (20,20) próximo à energia de Fermi para um valor de campo ainda longe do fechamento do gap ($E = 0.5$ e $\Delta = 5 \times 10^{-2}$). Os 4 estados de vale (K e K') do topo da banda de valência e os quatro estados de vale do fundo da banda de condução são indicados em vermelho com as correspondentes polarizações de spin e as correspondentes sub-redes (A ou B) que eles ocupam. Serão estes oito estados que irão eventualmente, com o aumento do campo elétrico e o fechamento do gap, formar os canais helicoidais alojados nas paredes de domínio criadas entre as regiões do nanotubo com diferentes propriedades topológicas.

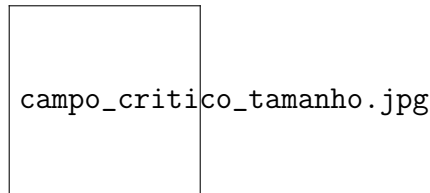


Figura 9: (a) Painel principal: dependência do campo crítico E_c com o diâmetro D do nanotubo de siliceno (em unidade da constante de rede $a = \sqrt{3}a_{SS}$). O traço horizontal indica o valor do campo crítico para uma folha de siliceno $E_c = \lambda_{SO}$, que é o caso assintótico de um tubo com raio no infinito. Inset: estrutura de bandas para um nanotubo com $n = 20$ cujo campo crítico encontrado foi $E_c = 2.94$. (b) Zoom na região do gap para $n = 20$ quando $E = 0.5$ e $\Delta = 5 \times 10^{-2}$. Em vermelho estão indicados os estados.

A Fig. 10(a) mostra o comportamento do topo da banda de valência (curva azul) e o fundo da banda de condução (curva vermelha) como função do campo elétrico, mostrando claramente dois regimes diferentes do fecha-

mento do gap. Isto é ilustrado de maneira mais clara na Fig. 10(b) onde o eixo vertical está em escala logarítmica.

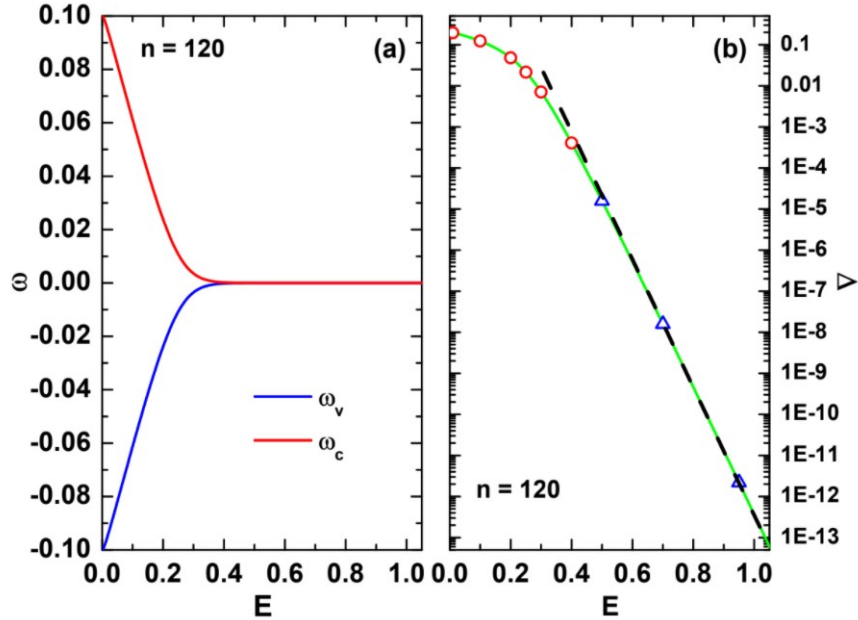


Figura 10: Variação do gap com a aplicação de um campo elétrico para um nanotubo com $n = 120$ e $\lambda_{SO} = 0.1$, cujo valor do gap para campo elétrico igual a zero é $\Delta = 0.2$. (a) Variação da posição do topo da banda de valência (ω_v , curva azul) e o fundo da banda de condução (ω_c , curva vermelha) como função do campo elétrico. (b) O gap Δ como função do campo elétrico E (curva verde) em um plot log-linear. Note que após um decaimento inicial mais lento, Δ decresce exponencialmente até $E = 1.05$. O pontilhado preto trata-se apenas de um guia para o leitor, enquanto os círculos vermelhos e triângulos azuis indicam valores de campo para os quais os estados foram analisados nas figuras da próxima seção.

6.2.2 Análise dos Estados de ‘Borda’

Uma vez entendido o comportamento do gap com relação à aplicação do campo elétrico, é preciso analisar o comportamento dos estados conforme o campo elétrico aumenta gradualmente. A Fig. 11, painéis (a) a (f), apre-

senta como o estado de vale $K_{v\downarrow}$ se comporta em relação à aplicação do campo elétrico no intervalo $0.01 \leq E \leq 0.4$. Inicialmente, para campos bastante baixos [$E = 0.01$, painel (a)], o estado $K_{v\downarrow}$ está centrado na parte inferior do nanotubo ($\theta_i = \pi$), localizado apenas na sub-rede A, e espalhado virtualmente por toda a circunferência do nanotubo. Aumentando o campo para $E = 0.1$, vemos que o estado se torna mais estreito e, mais importante, começa a adquirir peso espectral nos sítios da sub-rede B. Tal processo de ‘espalhamento’ para a outra sub-rede vai continuar até que o peso espectral nas duas sub-redes seja virtualmente o mesmo [painel (f)], enquanto o estado vai também se dividir simetricamente em dois ao redor do seu centro [painéis (d) a (f)]. Os valores de campo aqui mostrados correspondem aos círculos vermelhos mostrados na Fig. 10(b), antes que o decaimento puramente exponencial do gap se inicie [triângulos azuis da Fig. 10(b)]. O comportamento do estado $K_{v\downarrow}$ para tais valores de campo [triângulos azuis da Fig. 10(b)] apenas finaliza o comportamento mostrado na Fig. 11(f), ou seja, as duas metades do estado continuam a se tornar mais estreitas e a se afastar uma da outra, indicando que a parede de domínio já se formou e que ela está se movendo para as laterais do nanotubo, ‘arrastando’ consigo cada metade do estado helicoidal. É importante notar que durante este processo todo a polarização de spin do estado $K_{v\downarrow}$ se mantém, nesse caso com spin negativo. Os outros 7 estados, 3 ‘companheiros’ do estado $K_{v\downarrow}$, que se localizam, a campos baixos, também na parte de baixo do tubo, e outros 4 que se originam na parte superior do tubo, têm comportamento exatamente igual ao descrito na Fig. 11.

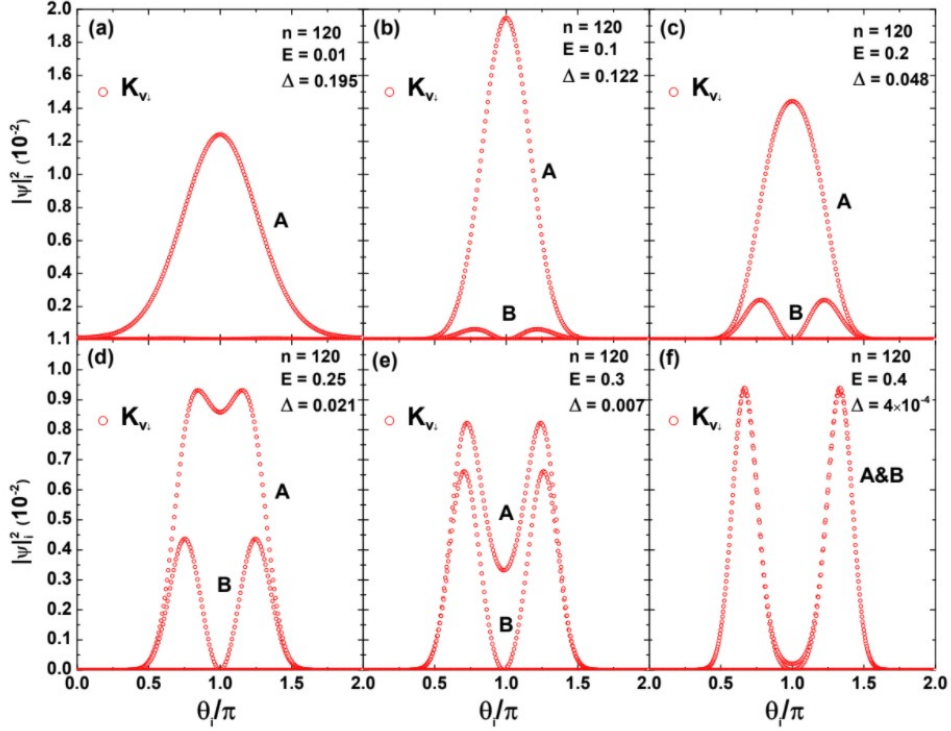


Figura 11: (a) a (f): evolução do estado $K_{v\downarrow}$ para $0.01 \leq E \leq 0.4$. Nos painéis do topo, o estado gradualmente se estreita e começa a adquirir uma componente na sub-rede B. Nos painéis inferiores o peso espectral na sub-rede B continua a aumentar até que o estado esteja virtualmente com o mesmo peso espectral nas duas sub-redes [painel(f)]. Em adição, o estado gradualmente se separa até adquirir duas partes desconectadas. Esses seis valores de campo correspondem aos 6 círculos indicados na Fig. 10(b). Nesse contexto, o gap varia no intervalo $0.195 \leq \Delta \leq 4.0 \times 10^{-4}$.

Conforme aumentamos o campo elétrico os estados localizam-se ao redor de $\theta = \pi(1 \pm \frac{1}{2})$, nas laterais do nanotubo. Os oito estados e suas localizações com o aumento do campo elétrico são apresentados na Fig. 12.

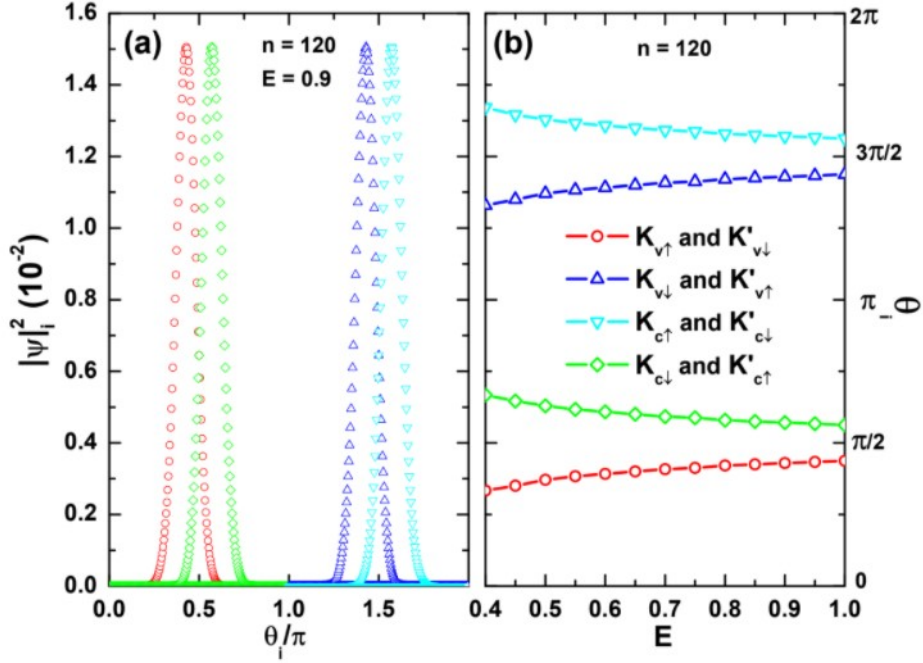


Figura 12: (a) Estados de ‘borda’ para $n = 120$ e $E=0.9$. Os estados são os mesmos que os indicados no painel (b). (b) Dependência da posição angular dos estados de borda θ_i como função do campo elétrico E .

Isso significa que no perímetro da seção transversal do nanotubo os estados localizam-se em quatro regiões $\theta_0 = \frac{\pi}{2} + \sigma$, $\theta_1 = \frac{\pi}{2} - \sigma$, $\theta_2 = \frac{3\pi}{2} + \sigma$ e $\theta_3 = \frac{3\pi}{2} - \sigma$, onde σ é o desvio das laterais do nanotubo ($\theta = \pi(1 \pm \frac{1}{2})$). A Fig 13 mostra esquematicamente como os estados de vale evoluem e se tornam estados helicoidais alojados nas quatro paredes de domínio criadas pela ação do campo elétrico através de uma transição de fase topológica. Os símbolos usados correspondem as mesmos da Fig. 12.

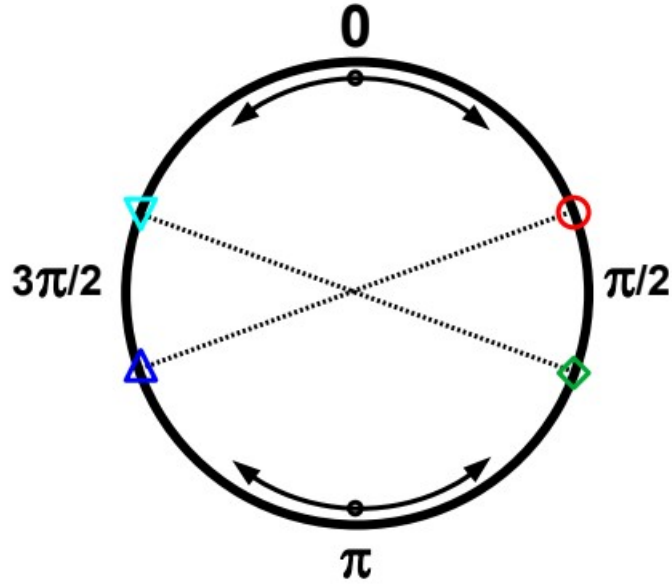


Figura 13: Desenho esquemático da seção transversal do nanotubo de siliceno com as localizações dos canais helicoidais criados pelo campo elétrico. As setas indicam o movimentos dos canais conforme o campo elétrico aumenta, partindo de zero em uma sub-rede no topo e outra na parte de baixo e caminhando para as posições próximas às laterais do nanotubo (os valores de θ_i citados anteriormente) com o aumento do campo elétrico.

7 Conclusões

Os resultados apresentados nos permitem dizer que o TCC proposto foi levado a uma conclusão satisfatória. Através de cálculos numéricos, conseguimos observar em detalhe como ocorre a formação de estados helicoidais no nanotubo de siliceno sob a ação de um campo elétrico externo: estados de vale do nanotubo (K e K'), que inicialmente (a campo baixo) ocupam praticamente a seção reta toda do nanotubo sofrem uma transformação peculiar sob a ação do campo: começam a se localizar (lentamente, no começo) e a se ‘espalhar’ para a outra sub-rede. Sofrem também uma divisão em

duas partes posicionadas simetricamente em relação ao seu centro. Tal espalhamento se acelera uma vez que o peso espectral do estado se espalha igualmente pelas duas sub-redes. Acreditamos que este seja o momento em que as quatro paredes de domínio estão completamente formadas. A partir daí, o estado já está alojado na parede de domínio e o subsequente aumento do campo elétrico irá apenas mover a parede de domínio em direção às laterais do nanotubo, arrastando com sigo o estado helicoidal, que durante todo este processo manteve sua polarização de spin original. Esforços subsequentes no nosso grupo vão tentar estabelecer se há uma possível configuração de ‘portas’ metálicas (metallic gates) que poderia produzir experimentalmente a geometria de campo elétrico aqui analisada.

Os estudos desse TCC/IC resultaram em um artigo submetido para a revista ‘**Journal of Physics: Condensed Matter**’.

8 Agradecimentos

Gostaria de agradecer à minha família, amigos e namorada pelo apoio durante a graduação pelos inúmeros momentos juntos. Já aos professores do instituto gostaria de agradecer principalmente dois deles, o prof. George Balster Martins pela orientação e amizade construída nesses quase dois anos e meio de orientação e ao prof. Gerson Ferreira pelas inúmeras dicas sobre programação durante quase toda minha graduação.

Gostaria também de agradecer à UFU, FAPEMIG, CNPq e PETROBRAS pelas várias bolsas que obtive durante a graduação.

Referências

- [1] M. Ezawa, “Monolayer Topological Insulators: Silicene, Germanene, and Stanene,” *J. Phys. Soc. Japan*, vol. 84, p. 121003, 2015.
- [2] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 3045–3067, Nov 2010.
- [3] G. L. Lay, “Silicene transistors,” *Nature Nanotechnology*, vol. 10, pp. 202–203, Feb. 2015.
- [4] J. Zhao, H. Liu, Z. Yu, R. Quhe, S. Zhou, Y. Wang, C. C. Liu, H. Zhong, N. Han, J. Lu, Y. Yao, and K. Wu, “Rise of silicene: A competitive 2d material,” *Progress in Materials Science*, vol. 83, pp. 24 – 151, 2016.
- [5] M. Ezawa, “A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field,” *New J. Phys.*, vol. 14, 2012.
- [6] M. D. Crescenzi, P. Castrucci, M. Scarselli, M. Diociaiuti, P. S. Chaudhari, C. Balasubramanian, T. M. Bhave, and S. V. Bhoraskar, “Experimental imaging of silicon nanotubes,” *Applied Physics Letters*, vol. 86, p. 231901, June 2005.
- [7] M. Ezawa, “Valley-polarized metals and quantum anomalous hall effect in silicene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, no. 5, p. 055502, 2012.
- [8] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, p. 3045, 2010.

- [9] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum Spin Hall Effect in Graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 226801, 2005.
- [10] C. L. Kane and E. J. Mele, “ Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 146802, 2005.
- [11] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells,” *Science*, vol. 318, p. 766, 2007.
- [12] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, p. 405, 1982.
- [13] B. Douçot, B. Duplantier, V. Pasquier, and V. Rivasseau, eds., *The Quantum Hall Effect Poincaré Seminar 2004*. Basel–Boston–Berlin: Birkhäuser Verlag, 1st ed., 2005.
- [14] M. Xu, T. Liang, M. Shi, and H. Chen, “Graphene-Like Two-Dimensional Materials,” *Chem. Rev.*, vol. 113, p. 3766, 2013.
- [15] J. Wang, S. Deng, Z. Liu, and Z. Liu, “The rare two-dimensional materials with Dirac cones,” *National Science Review*, vol. 2, p. 22, 2015.
- [16] M. Ezawa, “Spin valleytronics in silicene: Quantum spin Hall-quantum anomalous Hall insulators and single-valley semimetals,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, no. 15, p. 155415, 2013.
- [17] D. Griffiths, *Introduction of Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Inc., 1995.

- [18] D. J. Griffiths, *Introduction to electrodynamics; 4th ed.* Boston, MA: Pearson, 2013. Re-published by Cambridge University Press in 2017.
- [19] S.-Q. Shen, *Topological Insulators (Dirac Equation in Condensed Matters)*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1st ed., 2012.
- [20] A. Berzi, *Relativistic Fermions in Graphene*. Norwegian University of Science and Technology, 2012.
- [21] A. S., *Interações Rashba e Dresselhaus Induzidas por Deriva de Spin*. Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 2018.
- [22] G. M. Cristina Bena, “Remarks on the tight-binding model of graphene,” *New Journal of Physics*, 2009.
- [23] S. Pathak, *An Introduction to Second Quantization*. 2010.
- [24] D. P. Denteneer, *SECOND QUANTIZATION Lecture notes with course Quantum Theory*. 2008.
- [25] J.-C. Charlier, X. Blase, and S. Roche, “Electronic and transport properties of nanotubes,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, pp. 677–732, May 2007.
- [26] D. Kumar, Ashavani; Fathi, “A Review of Electronic Band Structure of Graphene and Carbon Nanotubes Using Tight Binding,” *Journal of Nanotechnology*, no. 10, p. 102001.
- [27] H.-S. Chou and K.-N. Huan, “Implications of parity and time-reversal symmetries in atoms,” *Chinese Journal of Physics*, vol. 33, p. 22, 1994.

- [28] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 1057–1110, Oct 2011.
- [29] Y. Ando, “Topological Insulator Materials,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 82, no. 10, p. 102001, 2013.
- [30] A. Allerdt, A. Feiguin, and G. Martins, “Kondo effect in a two-dimensional topological insulator: Exact results for adatom impurities,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 128, pp. 202 – 206, 2019. Spin-Orbit Coupled Materials.
- [31] A. H. Castro Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres, “Edge and surface states in the quantum Hall effect in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 205408, 2006.
- [32] “nanotubepaper code.” https://github.com/joaocassiano7x/nanotube_paper. Accessed: 2020-12-21.
- [33] J. Li, K. Wang, K. J. McFaul, Z. Zern, Y. Ren, K. Watanabe, T. Taniguchi, Z. Qiao, and J. Zhu, “Gate-controlled topological conducting channels in bilayer graphene,” *Nature Nanotechnology*, vol. 11, p. 1060–1065, Aug 2016.
- [34] C. A. T. T. e. a. Mania, E., “Topological valley transport at the curved boundary of a folded bilayer graphene,” 2019.
- [35] J. Klinovaja, G. J. Ferreira, and D. Loss, “Helical states in curved bilayer graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 235416, Dec 2012.

- [36] Y. Kim, K. Choi, J. Ihm, and H. Jin, “Topological domain walls and quantum valley hall effects in silicene,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 085429, Feb 2014.
- [37] M. Ezawa, “Dirac theory and topological phases of silicon nanotube,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 98, p. 67001, 2012.
- [38] J. Klinovaja, M. J. Schmidt, B. Braunecker, and D. Loss, “Helical modes in carbon nanotubes generated by strong electric fields,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 156809, Apr 2011.
- [39] J. Klinovaja, M. J. Schmidt, B. Braunecker, and D. Loss, “Carbon nanotubes in electric and magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 085452, Aug 2011.
- [40] J.-C. Charlier, X. Blase, and S. Roche, “Electronic and transport properties of nanotubes,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 79, pp. 677–732, May 2007.