

Bryan Douglas Nunes Assunção

Estados de borda pseudo-hélicos em redes hexagonais via método kp

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

7 de julho de 2021

Bryan Douglas Nunes Assunção

Estados de borda pseudo-hélicos em redes hexagonais via método k_p

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) apresentada ao Bacharelado em Física de Materiais da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Física de Materiais.

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Instituto de Física – INFIS

Orientador: Prof. Dr. Gerson Ferreira Junior

Coorientador: Dr. Poliana Heiffig Penteado

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

7 de julho de 2021

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais e avós pela oportunidade que não tiveram de estar concluindo esta graduação, aos meus colegas de graduação que quando necessário me ajudaram no decorrer deste curso, aos monitores que tive no ensino médio, que me fizeram ver que para se chegar ao ensino superior era necessário ir além do que se é dado no ensino público, e que por isto e pelos professores que me auxiliaram Edinei Reis e Eliton Doinizete, conquistei os prêmios em olimpíadas científicas que me incentivaram a fazer este curso. Prêmios que me levaram ao projeto de iniciação científica PICME, que com o orientador Fábio Bertoloto, que também o agradeço, me aprofundei em temas matemáticos como álgebra linear, análise real e topologia algébrica, que me agregaram muito, principalmente o rigor matemático exigido. Sou grato ao meu orientador Gerson, e a minha co-orientadora Poliana, por me instruírem neste projeto que me introduziu a esta área de pesquisa, por serem pacientes e insistentes em meio as dificuldades impostas por esta pandemia. Um obrigado a agencia de fomento CNPq que financiou este projeto.

Resumo

Neste trabalho, investigamos o surgimento dos chamados estados de borda pseudo-hélicos (FRANK et al., 2018) no grafeno através da teoria dos invariantes combinada com o método $k \cdot p$. O modelo tight-binding proposto por Frank e outros, descreve o grafeno o substrato. A presença do substrato quebra a simetria de sub-rede e permite novos termos no hamiltoniano: (i) um potencial escalonado e, mais importante, (ii) um acoplamento spin-órbita intrínseco escalonado. Como mostrado na Ref. (FRANK et al., 2018), este modelo suporta estados de borda protegidos em um sistema $\mathbb{Z}_2$ trivial. Em uma simetria de floco, estes estados (pseudo-hélicos) percorrem com spin up ao longo de uma borda zigzag e com spin down ao longo da outra, sendo conectado por tunelamento spin-flip nos estados armchair. Dentro do nosso calculo pelo método $k \cdot p$ com as condições de contorno (ARAÚJO et al., 2019), corroboramos essas descobertas e fornecemos uma compreensão detalhada desses estados de borda incomuns.

Agradecimentos: Este trabalho contou com apoio do CNPq, CAPES e FAPEMIG.

Abstract

In this work, we investigate the emergence of so-called pseudohelical edge states ([FRANK et al., 2018](#)) in graphene via the theory of invariants combined with the $k \cdot p$ method. The tight-binding model proposed by Frank *et al.* describes graphene on a substrate. The presence of the substrate breaks the sublattice symmetry and allows for new terms in the Hamiltonian: (i) a staggered potential and, most importantly, (ii) a staggered intrinsic spin-orbit coupling. As it is shown in Ref. ([FRANK et al., 2018](#)), this model supports protected edge states in a $\mathbb{Z}_2$ trivial system. In a flake geometry, these states (pseudohelical) run with spin up along one zigzag edge and with spin down along the other, being connected by spin-flip tunneling at the armchair edges. Within our $k \cdot p$ calculation and using appropriate boundary conditions ([ARAÚJO et al., 2019](#)), we corroborate these findings and provide a detailed comprehension of these unusual edge states.

Acknowledgments: This work was supported by CNPq, CAPES, and FAPEMIG.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Grafeno	9
1.2	Isolantes topológicos 2D	10
1.3	Estados de borda pseudo-hélicos	11
1.4	Objetivos e organização deste TCC	12
2	MÉTODOS	13
2.1	Grafeno	13
2.1.1	Rede recíproca	14
2.1.2	Funções de base	15
2.2	Fundamentos de teoria de grupos	15
2.2.1	Grupos cristalinos	16
2.2.2	O grupo duplo	18
2.3	O método $k \cdot p$ e Hamiltonianos modelo	19
2.3.1	O Hamiltoniano $k \cdot p$	19
2.3.2	Modelo efetivo para grafeno via $k \cdot p$	20
2.3.3	Resolução por $k \cdot p$	20
2.3.4	Método $k \cdot p$ com spin-órbita	22
2.3.5	Resolução por $k \cdot p$ com spin	23
2.4	Método dos invariantes	25
2.4.1	Modelo efetivo para grafeno via método dos invariantes	25
2.4.2	Pacote Python Qsymm	28
2.5	Confinamento via massas de Wilson	28
2.5.1	Massas de Wilson para nanofitas de grafeno	30
3	RESULTADOS	33
3.1	Grafeno com simetria quebradas pelo substrato	33
3.1.1	Grupo de simetria e representações	33
3.1.2	Modelo efetivo	34
3.1.3	Massas de Wilson	34
3.2	Nanofitas	35
3.2.1	Nanofitas tipo armchair	35
3.2.2	Nanofitas tipo zigzag	37
3.3	Nanofloco	38
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	41

REFERÊNCIAS	43
 APÊNDICES	 47
APÊNDICE A – TEOREMA DE BLOCH	49
APÊNDICE B – GRUPO DUPLO	51
APÊNDICE C – REPRESENTAÇÕES NO ESPAÇO DE SPIN . . .	55
APÊNDICE D – CÓDIGOS	57

1 Introdução

É de interesse da física da matéria condensada o estudo das propriedades vinculadas aos diferentes estados da matéria; em particular, o transporte dos elétrons para o uso da informação. Os semicondutores e os transistores têm sido bem eficientes ao utilizar a informação binária da passagem e não passagem de correntes elétricas para se construir todos os algoritmos responsáveis pelo funcionamento dos dispositivos eletrônicos. Porém, há um limite do tamanho físico para o funcionamento dos transistores, sendo necessário o estudo de alternativas para que se continue o desenvolvimento tecnológico. Uma delas é a spintrônica, que propõe o uso do spin como a informação binária, em que este pode ser up ou down. Elétrons com propagação de spin bem definidos são obtidos, por exemplo, em estados hélicos na borda de alguns isolantes topológicos, dentre eles o grafeno, um material em ascensão que apresenta também propriedades térmicas, ópticas e estruturais de interesse para aplicações tecnológicas. Na próxima seção, apresentaremos mais detalhes deste material.

1.1 Grafeno

O grafeno é uma estrutura cristalina bidimensional de átomos de carbono que formam uma rede hexagonal. Ele foi muito estudado inicialmente como um ponto de partida para se entender e descrever compostos mais complexos constituídos de carbono, como o diamante e a grafite, uma vez que, não se esperava sintetizá-lo, assim como outros materiais bidimensionais, devido a uma possível instabilidade térmica. O grafeno foi, no entanto, o primeiro material bidimensional obtido por meio de um processo chamado clivagem micromecânica ([NOVOSELOV, 2004](#)), despertando assim nos últimos anos uma grande demanda de estudos sobre o seu potencial de aplicação.

Do ponto de vista eletrônico o grafeno é um semicondutor de gap zero. Sua estrutura de bandas foi investigada pela primeira vez em 1947 por P. R. Wallace ([WALLACE, 1947](#)), que obteve para baixas energias um Hamiltoniano do tipo Dirac, como consequência de sua simetria cristalina. Abriu-se assim, a possibilidade de se obter propriedades similares às observadas na eletrodinâmica quântica sem utilizar sistemas de altas energias. Uma das propriedades características do grafeno é observada no efeito Hall quântico de spin ([KANE; MELE, 2005](#)). Este se caracteriza por uma ininterrupta e igualmente espaçada escada de condutividade Hall σ_{xy} de correntes de elétrons com spin-up e spin-down com sentidos opostos de propagação nas bordas do material. Este fenômeno é característico de uma ordem topológica não trivial de um isolante topológico, materiais que serão descritos na próxima seção.

1.2 Isolantes topológicos 2D

Isolantes topológicos são materiais caracterizados por um invariante topológico discreto que permanece invariante por deformações adiabáticas do sistema sem um fechamento do gap (FRUCHART; CARPENTIER, 2013), (HASAN; KANE, 2010). Dentre as diferentes ordens topológicas possíveis há uma propriedade universal para uma topologia não trivial de um bulk: a de que a sua superfície é necessariamente metálica. Esta é a consequência de uma estrutura de bandas interpolada e contínua, que ao sair do vácuo, topologicamente trivial, para um material topologicamente não-trivial exige o fechamento do gap.

A primeira fase topológica observada foi descoberta em 1980 por Klaus von Klitzing (KLITZING; DORDA; PEPPER, 1980). Esta é denominada primeiro número de Chern e é obtida em um gás de elétrons bidimensional submetido a um forte campo magnético transversal que resulta em um tipo de efeito Hall, o efeito Hall quântico. Neste os estados metálicos e quirais se propagam em uma única direção nas bordas, com uma condutância discreta $\sigma_{xy} = Ne^2/h$, com N inteiro (LAUGHLIN, 1981; THOULESS et al., 1982). Para cada um destes platôs há um número de Chern associado, sendo estes apenas valores inteiros.

O invariante topológico é calculado pela integral de curvatura de Berry sobre o torus definido pela zona de Brillouin (FRUCHART; CARPENTIER, 2013). No caso bidimensional este é o número de Chern (n_m) dado por

$$n_m = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} F_m d^2\mathbf{k}, \quad (1.1)$$

onde a curvatura de Berry $F_m = \nabla \times A_m$ é definida para cada estado u_m do Hamiltoniano,

$$A_m = i \langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle, \quad (1.2)$$

onde A_m é a conexão de Berry. Em um isolante topológico o subconjunto das bandas de valência possui uma topologia torcida no torus, enquanto o conjunto completo é trivial.

Nesta ordem topológica apresentada há quebra de simetria de reversão temporal, pois os campos magnéticos usados são elementos externos ao sistema. Estes campos possuem alta ordem de grandeza para se alcançar estes efeitos topológicos, sendo difíceis de serem realizados. Assim, levantou-se o questionamento de que se a classificação topológica poderia ser estendida a outros sistemas. Posteriormente outros trabalhos (QI; ZHANG, 2010; HALDANE, 1988; ZHANG, 2001; MURAKAMI, 2003) propuseram modelos que utilizam um fluxo magnético periódico ou a interação spin-órbita intrínseca, esta que preserva a simetria de reversão temporal, ao invés destes fortes campos. Posteriormente foram efetivamente caracterizados sistemas com interação spin-órbita intrínseca nos trabalhos

de C. Kane e G. Mele (KANE; MELE, 2005), Bernevig, Hughes e Zhang (BERNEVIG; ZHANG, 2006). Estes isolantes topológicos com alto acoplamento spin-órbita preservam a simetria de reversão temporal. Isto implica que por meio do teorema de Kramers (KLEIN, 1952), os estados do sistema são ao menos duas vezes degenerados com autovalores opostos no operador momento e possuem spin opostos. Pode-se definir a partir deste a polarização de reversão de tempo P_θ , que possui apenas soluções inteiras e define um invariante topológico (FU; KANE, 2006). Fisicamente, este define dois estados com diferentes polarizações; seus diferentes valores são classificados no grupo $\mathbb{Z}_2$ dos números inteiros de módulo 2.

Os estados de borda para estes isolantes possuem direção de propagação dos elétrons acoplada ao spin, tal que estados com spin opostos se movem em direções opostas. Estes são denominados estados de borda helicoidais e sua existência, assim como o invariante topológico, é dependente da simetria de reversão temporal. Em 2007, o primeiro isolante topológico 2D, idealizado por meio de poços quânticos de HgTe/CdTe (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006), foi realizado experimentalmente (KONIG et al., 2007).

Ainda em 2007, grupos teóricos descobriram várias classes de materiais topológicos tridimensionais compostos de bismuto $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ (FU; KANE, 2007; ZHANG et al., 2009b), Bi_2Se_3 e Bi_2Te_3 (ZHANG et al., 2009a), posteriormente realizados experimentalmente (HSIEH et al., 2008; XIA et al., 2009). O que caracteriza estes isolantes é a existência de estados de superfície com dispersão linear obedecendo a equação de Dirac.

Há uma outra classe de isolantes topológicos, os isolantes topológicos cristalinos (ANDO; FU, 2015). Estes têm as fases protegidas por operadores de simetria da rede cristalina. Assim, não tem como levar adiabaticamente este a um isolante topológico trivial. Um exemplo destes são os isolantes bidimensionais protegidos por simetria de reflexão, nestes os estados da base do hamiltoniano possuem autovalores $\{-i, +i\}$ para o operador reflexão. Nestes isolantes há dois invariantes independentes, o número de Chern total $N_i + N_{-i}$ dividido nos dois grupos de autoestados e o número de Chern de reflexão dado por $(N_i - N_{-i})/2$. Esta última fase é a sua fase cristalina, que independe do número de Chern ser trivial.

1.3 Estados de borda pseudo-hélicos

Na Ref. (FRANK et al., 2018) os autores estudaram, utilizando o método tight-binding, um modelo para o grafeno similar ao de Haldane (HALDANE, 1988). Neste modelo, no entanto, há uma quebra de simetria de subrede devido à presença de um substrato que induz acoplamento spin-órbita intrínseco e potencial escalonados. Tal modelo prevê estados hélicos topológicos $\mathbb{Z}_2$ usuais e também suporta estados de borda spin-polarizados protegidos por reversão temporal na fase trivial para nanofitas zigzag. Esses estados foram

denominados pseudo-hélicos e podem se conectar ao lado oposto da nanofita através de tunelamento na geometria de nanoflakes.

1.4 Objetivos e organização deste TCC

Este projeto visa reproduzir os resultados da Ref. (FRANK et al., 2018), obtidos numericamente via tight-binding, através de uma abordagem alternativa e complementar: o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ associado à teoria de grupos e cálculo numérico.

No capítulo 2 descrevemos inicialmente os métodos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e dos invariantes. Apresentamos os conceitos necessários de estado sólido e de teoria de grupos para suas descrições, tais como o conceito de rede cristalina, rede recíproca, grupos de simetria e grupo duplo, com algumas deduções importantes sintetizadas nos apêndices. Posteriormente, obtemos o Hamiltoniano efetivo para o grafeno em baixas energias através dos métodos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e dos invariantes com e sem spin. Também introduzimos o conceito da massa de Wilson, um termo de correção quadrático, que entrará como a condição de contorno quando tratarmos o caso do grafeno confinado (nanofitas zigzag e armchair e nanoflakes).

No capítulo 3 deduzimos o grupo de simetria do sistema da Ref. (FRANK et al., 2018) e calculamos o Hamiltoniano efetivo por meio do resultado obtido para o grafeno com spin no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e também por meio do método dos invariantes. Em seguida calculamos a estrutura de bandas e a densidade de estados para três diferentes tipos de confinamento: nanofitas armchair e zigzag e nanoflakes.

2 Métodos

Neste capítulo serão descritos os métodos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e o método dos invariantes aplicados ao grafeno. Já no capítulo seguinte iremos aplicar estes fundamentos para o estudo dos estados pseudo-hélicos descritos via método *tight-binding* por (FRANK et al., 2018).

2.1 Grafeno

Por definição, a rede de Bravais é o conjunto de pontos em um espaço vetorial, cujos vetores $\mathbf{R}$ satisfazem a restrição

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (2.1)$$

com $\{n_1, n_2, n_3\} \subset \mathbb{Z}$ e sendo $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ os vetores da base. No caso do grafeno, a rede hexagonal de arestas $a_0 = 0.142$ nm, Fig. 1, é descrita pelos vetores

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3}{2}a_0\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a_0\hat{y}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{3}{2}a_0\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}a_0\hat{y}, \quad (2.3)$$

sendo suficiente uma representação em um espaço vetorial bidimensional, uma vez que o grafeno é um sólido bidimensional. Porém, nota-se que a estrutura hexagonal do grafeno não constitui uma rede de Bravais, mas sim duas redes triangulares de mesma cardinalidade. Alternativamente, é mais simples considerar uma rede de Bravais dada pelos vetores $\mathbf{a}_i$ acima e uma base que descreve os dois átomos não-equivalentes, $\mathbf{d}_0 = -a_0\hat{x}$ e $\mathbf{d}_1 = a_0\hat{x}$.

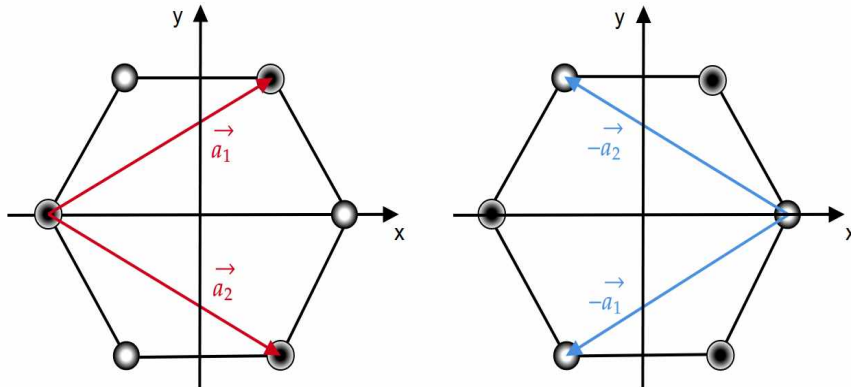


Figura 1 – Redes triangulares que constituem uma rede de Bravais.

2.1.1 Rede recíproca

Como a rede cristalina é periódica, o teorema de Bloch (veja Apêndice A) estabelece que a função de onda é invariante por translações $\mathbf{T}$ módulo uma fase $i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}$. Como $\mathbf{R}$ é da forma $n_i \mathbf{a}_i$, para $\mathbf{T} = N_i \mathbf{a}_i$ a periodicidade exata deve ser recuperada para $N_i \rightarrow \infty$, então segue que $\mathbf{k} \cdot (N_i \mathbf{a}_i) = 2\pi \text{ mod } \mathbb{Z}$. Assim, $\mathbf{k}$ é um vetor do dual no produto canônico de $\mathbf{r}$, tal que a base deste pode ser definida da forma $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$, no qual $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$.

Considerando-se os vetores $\mathbf{a}_i$ acima, segue que

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad (2.4)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}), \quad (2.5)$$

como ilustrado na figura 2

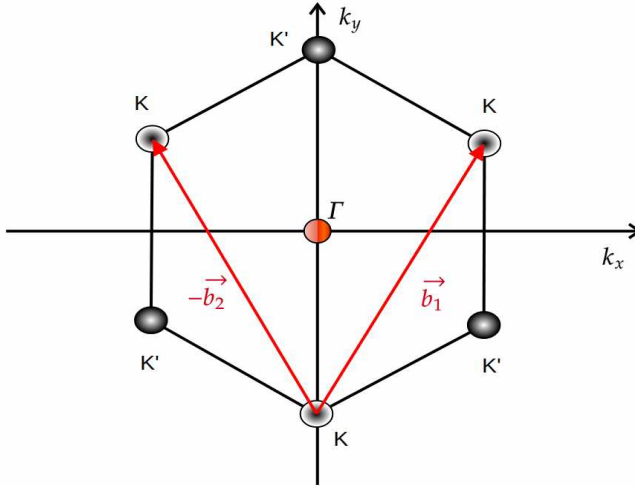


Figura 2 – Pontos de simetria analisados na zona de Brillouin

Em (ASHCROFT; MERMIN, 1976) é definida a zona de Brillouin para uma rede cristalina, funcionando como uma célula unitária para rede recíproca, uma vez que esta contém apenas um dos pontos Γ de alta simetria e possui uma periodicidade que cobre toda a rede. Como está representado em (Fig. 2), a zona de Brillouin é delimitada pelo polígono obtido pelas mediatrizes dos segmentos que conectam os pontos Γ . Os vértices da zona de Brillouin são divididos em dois conjuntos fechados por translação em vetores da rede recíproca (Fig. 2). O espectro de baixas energias do grafeno se concentra nos pontos K e K' da zona de Brillouin, Fig. 2. Estes têm coordenadas

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}), \quad (2.6)$$

$$\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}). \quad (2.7)$$

2.1.2 Funções de base

Analisando a figura 1 as ligações simétricas efetuadas por um átomo de carbono indicam que estas pertencem a um mesmo tipo. O que de fato ocorre, pois dos orbitais de valência do átomo de carbono ($2s$, $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$), os $2s$, $2p_x$ e $2p_y$ se combinam para formar orbitais sp^2 . Estes orbitais participam das ligações mais fortes realizadas pelo grafeno, do tipo σ (ligante) e σ^* (antiligante), não sobrepondo o nível de energia de Fermi, que é o interesse deste trabalho.

Os orbitais $2p_z$, realizam ligações π e π^* , mais fracas e não provenientes de uma hibridização, porém, seus níveis de energia se sobrepõem ao nível de Fermi (E_F), implicando que para baixas energias, basta considerar contribuições $f_z(\mathbf{r})$ dos orbitais p_z para os estados do sistema.

Segue pelo teorema de Bloch que há dois estados ψ_A e ψ_B definidos pelas operações de translações para as respectivas subredes. Havendo apenas contribuições dos orbitais p_z , tais estados são expressos por

$$u_a(\mathbf{r}) = e^{ik_0 \cdot (-a_0 \hat{x})} f_z(\mathbf{r} - a_0 \hat{x}) + e^{ik_0 \cdot (-a_0 \hat{x} + \mathbf{a}_1)} f_z(\mathbf{r} - a_0 \hat{x} + \mathbf{a}_1) + \dots, \quad (2.8)$$

$$u_b(\mathbf{r}) = e^{ik_0 \cdot (+a_0 \hat{x})} f_z(\mathbf{r} + a_0 \hat{x}) + e^{ik_0 \cdot (+a_0 \hat{x} - \mathbf{a}_1)} f_z(\mathbf{r} + a_0 \hat{x} - \mathbf{a}_1) + \dots, \quad (2.9)$$

$$\psi_{\mu, \mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mu}(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

com $\mu = \{a, b\}$ e i o índice que especifica o sítio em questão.

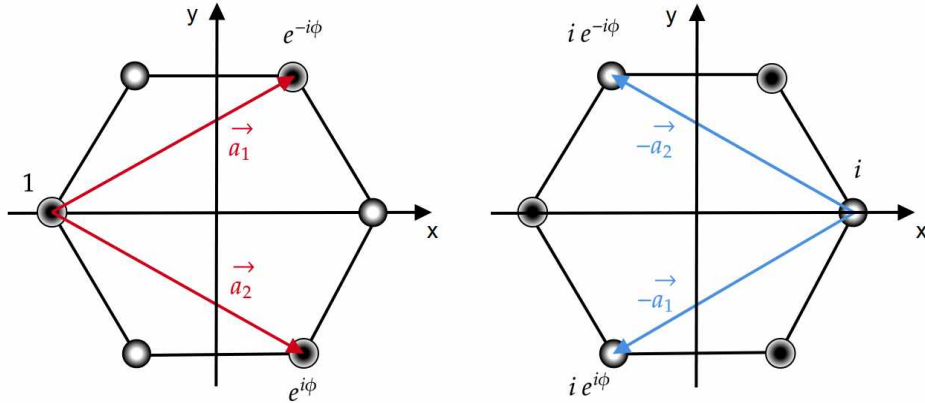


Figura 3 – Rede de Bravais do grafeno, com os respectivos estados calculados no ponto K , com $\phi = \frac{2\pi}{3}$

2.2 Fundamentos de teoria de grupos

Nesta seção apresentamos conceitos essenciais de teoria de grupos. Definimos o grupo cristalino do grafeno e as representações irredutíveis no espaço de Hilbert e no espaço de coordenadas. Começamos pelo grupo simples, sem spin, e depois apresentamos as representações no grupo duplo com spin.

2.2.1 Grupos cristalinos

Uma operação de simetria sobre um sistema geométrico como uma rede cristalográfica é definida como aquela que após sua ação sobre o sistema o deixa invariante, ou seja, os elementos geométricos como segmentos de retas, pontos e planos estão ocupando as mesmas posições do estado inicial do sistema.

Aplicada uma operação de simetria C no grafeno, os átomos em suas posições finais devem ocupar as mesmas coordenadas iniciais, implicando em uma invariância para o Hamiltoniano ($[H, C] = 0$). São operações de simetria: rotações, reflexões, translações, inversão e a simetria de reversão temporal (FAZZIO, 2009). O conjunto de todas estas operações invariantes entre si constitui um grupo de simetria que satisfaz as quatro propriedades que o define (FAZZIO, 2009), assim como outros conjuntos de operadores lineares.

Como definido em álgebra linear (COELHO; LOURENÇO, 2005), operadores lineares possuem representações matriciais que podem ser agrupadas em blocos matriciais menores e irredutíveis a escolha da base do espaço vetorial em questão, estas são denominadas representações irredutíveis.

Em teoria de grupos, verifica-se que o conjunto de representações irredutíveis dos seus operadores é finito e igual ao número de operadores do grupo. Além de garantir a construção da tabela de caracteres de um grupo, este resultado permite descrever os operadores de uma equação através de sua representação perante a este grupo, o que será feito no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Analisando a célula unitária Fig. (4), vemos que o grupo de operadores de simetria para este sistema é o D_{6h} . É de interesse para o método dos invariantes a obtenção do grupo de simetria do Hamiltoniano em questão, porém, além de depender de $\mathbf{r}$, o Hamiltoniano depende do parâmetro $\mathbf{k}$, que para este trabalho serão os pontos K e K' de simetria D_{3h} , como expresso na Fig. (5). Portanto, a simetria do Hamiltoniano é a D_{3h} , porém, para um primeiro caso será suficiente uma descrição no plano xy , obtendo um grupo de simetria C_{3v} cujos operadores são gerados pela rotação C_3 e a reflexão σ_v , sendo assim, suficiente uma análise de apenas estes.

A fase de Bloch (veja Apêndice A) obtida por translações dos vetores base no ponto K é dada por

$$\phi = \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{2\pi}{3} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2, \quad (2.11)$$

sendo o inverso para o ponto K'

$$-\phi = \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}_1 = -\mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}_2. \quad (2.12)$$

As fases para cada subrede são mostradas na Fig. (3). Atuando as operações C_3 e

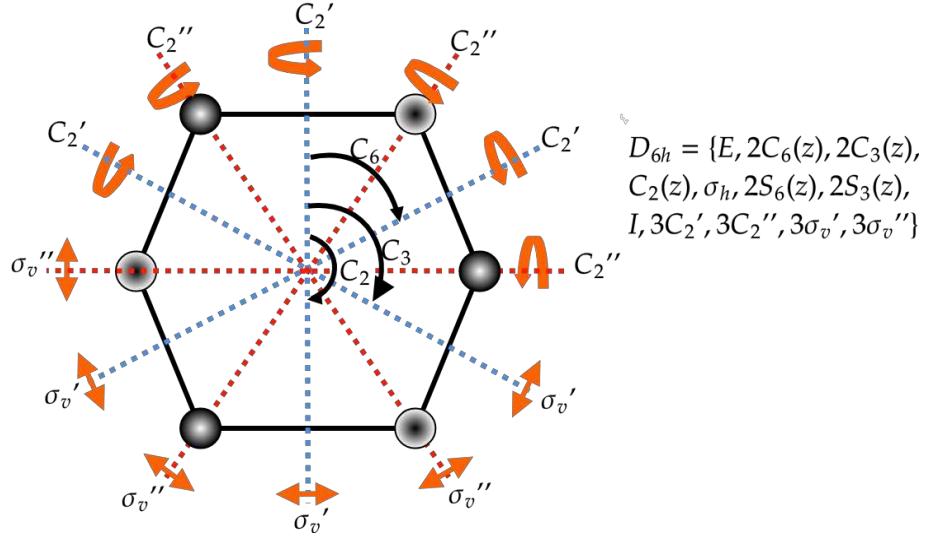


Figura 4 – Célula unitária do grafeno com as suas operações de simetria.

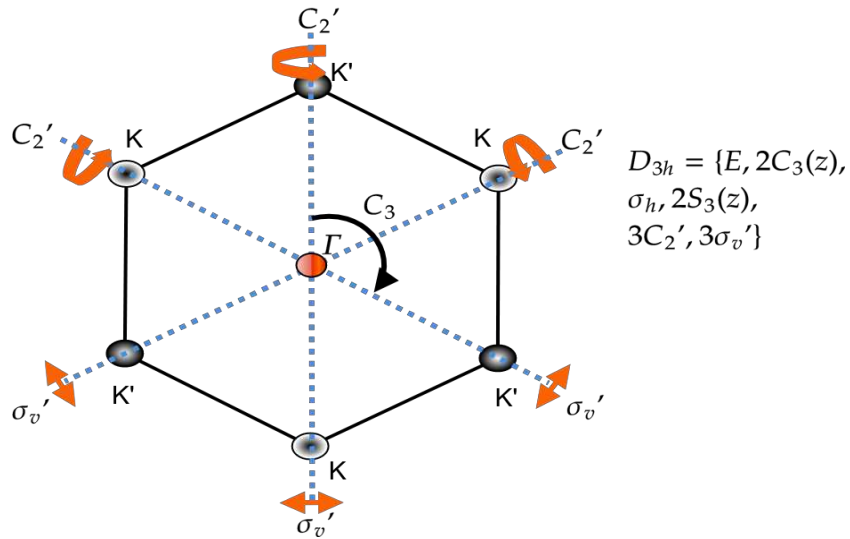


Figura 5 – Zona de Brillouin do grafeno com as operações de simetria para o ponto K ou K' .

σ_v no hexágono da figura obtém-se as representações destes na base $\{\psi_a, \psi_b\}$ e ponto K , como segue

$$D^\psi(C_3) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} = (\cos \phi) \sigma_0 - (i \sin \phi) \sigma_z \quad (2.13)$$

$$D^\psi(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_y, \quad (2.14)$$

onde $\phi = \frac{2\pi}{3}$ e σ são as matrizes de Pauli, dadas por

$$\sigma_a \sigma_b = \delta_{ab} I + i\epsilon_{abc} \sigma_c, \quad (2.15)$$

$$\sigma_x = \sigma_1 = \tau_x = s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

$$\sigma_y = \sigma_2 = \tau_y = s_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$\sigma_z = \sigma_3 = \tau_z = s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Como veremos nas próximas seções, σ , τ e s estão associados aos graus de liberdade de subrede (pseudospin), vale (K e K') e spin, respectivamente.

Analogamente, para o ponto K' temos $\mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{2\pi}{3}$ e $\mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{-2\pi}{3}$ e as representações dos operadores C_3 e σ_v na base $\{\psi_a, \psi_b\}$ são, respectivamente,

$$D^\psi(C_3) = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix} = (\cos \phi) \sigma_0 + (i \sin \phi) \sigma_z \quad (2.19)$$

$$D^\psi(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_y. \quad (2.20)$$

2.2.2 O grupo duplo

Para se considerar o spin nos estados do grafeno, deve-se efetuar um produto tensorial entre a base já obtida Eq. (2.10), com a base usual para o spin $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Analogamente para se obter as representações dos operadores de simetria efetua-se o produto $O(3) \otimes U(2)$, em que estes são os espaços das matrizes de representações em $\mathbb{R}^3$ e no espaço de spin respectivamente.

Como mostrado no Apêndice B, há o dobro de operadores no espaço de rotações $SU(2)$ do que no espaço de rotações $SO(3)$, em que para cada operador rotação em $SO(3)$ há um igual em $SU(2)$ e outro com mesmo ângulo e periodicidade diferente. Segue do fato das representações dos demais operadores de simetria serem representados por operadores de rotação (Apêndice C), que todos os operadores de simetria que não são rotações em 2π terão o dobro de representações em $U(2)$, sendo necessário dobrar $O(3)$ para efetuar o produto tensorial, este produto resultante é denominado grupo duplo.

Considerando a simetria completa em $\mathbb{R}^3$ do grafeno, a do grupo D_{3h} , gerado pelos operadores C_3 , σ_v e σ_h , adicionado do operador $T \cdot M_y$ resultante do produto do operador de reversão temporal e a reflexão em y , a representação destes na base

$\{\psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle\}$ são

$$C_3 = e^{-is_z\pi/3} \otimes (\cos(\phi)\sigma_0 - i\sin(\phi)\sigma_z) \quad (2.21)$$

$$\sigma_v = e^{-is_y\pi/2} \otimes (-\sigma_y) \quad (2.22)$$

$$\sigma_h = e^{-is_z\pi/2} \otimes (-\sigma_0) \quad (2.23)$$

$$T \cdot M_y = (s_y \cdot e^{-is_y\pi/2}) \otimes \sigma_z, \quad (2.24)$$

há uma troca de sinal em σ_h devido aos estados serem combinações lineares de orbitais do tipo p_z .

2.3 O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e Hamiltonianos modelo

No método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ utilizamos o teorema de Bloch para reescrever a equação de Schrödinger em termos de uma expansão nos auto-estados de um certo ponto $\mathbf{k}$ de interesse. Assim, define-se um H_0 diagonal nesta base e seu complemento H' é tratado como uma perturbação. Nesta seção ilustramos este procedimento e deduzimos o H do grafeno via método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

2.3.1 O Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

A equação de Schrödinger para um elétron de massa m_e num potencial cristalino $U(\mathbf{r})$ é dada por

$$\left[\frac{p^2}{2m_e} + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mu,\mathbf{k}} \psi_{\mu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.25)$$

onde μ representa o índice de banda. Sendo $U(\mathbf{r})$ invariante pelas translações de Bravais, podemos usar o teorema de Bloch na forma $\psi_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}_0+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} u_{\mu}(\mathbf{r})$, com $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{q}$, para obter uma expressão para o Hamiltoniano em $\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}$ a partir do Hamiltoniano em $\mathbf{k}_0$, cujas soluções são conhecidas, isto é,

$$\left[\frac{p^2}{2m_e} + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = E_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}} \psi_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad (2.26)$$

$$\Rightarrow \left[\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] e^{i(\mathbf{k}_0+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} u_{\mu}(\mathbf{r}) = E_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}} e^{i\mathbf{k}_0+\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mu}(\mathbf{r}). \quad (2.27)$$

Usando $\psi_{\mu,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} u_{\mu}(\mathbf{r})$, segue que

$$\begin{aligned} & \left[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + 2 \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \nabla + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mu,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \\ & = E_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_{\mu,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\Rightarrow [H_0 + H'] \psi_{\mu,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = (E_{\mu,\mathbf{k}_0+\mathbf{q}} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}) \psi_{\mu,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (2.29)$$

com

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\mathbf{r}), \quad (2.30)$$

$$H' = \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.31)$$

Este Hamiltoniano é conhecido como Hamiltoniano kp . Especificamente no caso do grafeno estamos interessados nos pontos $\mathbf{k}_0 = K$ ou K' .

Usualmente assume-se que a base escolhida $\psi_{\mu, \mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ diagonaliza $H_{\mathbf{k}_0}$ e trata-se o termo $H' = \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}$ como uma perturbação, tomando $q = k - k_0$ pequeno, podendo assim eliminar o termo quadrático.

2.3.2 Modelo efetivo para grafeno via $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Os estados $\{\psi_a(\mathbf{r}), \psi_b(\mathbf{r})\}$ são uma base suficiente para a descrição do sistema em baixas energias nos pontos de simetria K e K' , sendo que qualquer estado com estas restrições são combinações lineares desta base, como segue

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \psi_i(\mathbf{r}) = c_a \psi_a(\mathbf{r}) + c_b \psi_b(\mathbf{r}). \quad (2.32)$$

Substituindo a Eq. (2.10) na Eq. (2.29) e multiplicando pela esquerda por $\psi_j(\mathbf{r})$, com $j \in \{a, b\}$, obtemos

$$\sum_i \left[(H_0)_{ji} \delta_{ji} + \langle \psi_j | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_i \rangle \right] c_i = E_{\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}} c_j. \quad (2.33)$$

Assim a matriz final do Hamiltoniano é dada por

$$H = \begin{pmatrix} (H_0)_{aa} + \langle \psi_a | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_a \rangle & \langle \psi_a | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_b \rangle \\ \langle \psi_b | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_a \rangle & (H_0)_{bb} + \langle \psi_b | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_b \rangle \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

2.3.3 Resolução por $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Para uma análise da simetria de um único operador X do Hamiltoniano via $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ serão diagonalizadas as representações dos operadores do grupo simetria no espaço de X , isto é, vamos descrever X em termos dos autovetores destas operações de simetria. As representações dos operadores geradores de C_{3v} para vetores do plano xy são

$$D^r(C_3) = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

$$D^r(\sigma_v) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

com ϕ dado por (2.11). Diagonalizando $D^r(C_3)$, encontramos como autovetores $(\hat{\mathbf{i}} - i\hat{\mathbf{j}})$ e $(\hat{\mathbf{i}} + i\hat{\mathbf{j}})$ com respectivos autovalores $e^{i\phi}$ e $e^{-i\phi}$. De maneira análoga, para o espaço de

momento temos $(p_x - ip_y)$, $(p_x + ip_y)$ como autovetores com respectivos autovalores $e^{i\phi}$ e $e^{-i\phi}$.

Rescrevendo o termo $\frac{-i\hbar^2}{m_e} \mathbf{q} \cdot \nabla$ da Eq. (2.34), temos

$$\begin{aligned} \frac{-i\hbar^2}{m_e} \mathbf{q} \cdot \nabla &= \frac{-i\hbar^2}{m_e} (\mathbf{q}_x - i\mathbf{q}_y) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \frac{-i\hbar^2}{m_e} (\mathbf{q}_x + i\mathbf{q}_y) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Vamos então aplicar a identidade $C_3^{-1} C_3 = I$ nos elementos de matriz do Hamiltoniano em (2.34). Para isso utilizamos as relações $(C_3 |\psi\rangle)^* = \langle \psi | C_3^{-1}$ na representação dada em (2.13), obtendo as seguintes relações

$$\langle \psi_a | C_3^{-1} = e^{\frac{i2\pi}{3}} \langle \psi_a |, \quad (2.38)$$

$$\langle \psi_b | C_3^{-1} = e^{\frac{-i2\pi}{3}} \langle \psi_b |, \quad (2.39)$$

$$C_3 |\psi_a\rangle = e^{\frac{-i2\pi}{3}} |\psi_a\rangle, \quad (2.40)$$

$$C_3 |\psi_b\rangle = e^{\frac{i2\pi}{3}} |\psi_b\rangle. \quad (2.41)$$

Os termos $\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} = C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right)$, usando a representação (2.35), são dados por

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} = C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (2.42)$$

$$C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} = e^{\frac{-i4\pi}{3}} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (2.43)$$

$$C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} = e^{\frac{i4\pi}{3}} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (2.44)$$

Substituindo as expressões acima no elemento de matriz $\langle \psi_a | \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} | \psi_a \rangle$ temos

$$\begin{aligned} &\langle \psi_a | \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_a \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y) = \\ &= \langle \psi_a | C_3^{-1} \left[C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} \right] C_3 | \psi_a \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y) = \\ &= e^{\frac{-i2\pi}{3}} e^{\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{-i4\pi}{3}} \langle \psi_a | \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle \psi_a | \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y) = 0. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Analogamente, $\langle \psi_b | \frac{-i\hbar^2}{m_e} \mathbf{q} \cdot \nabla | \psi_b \rangle = 0$. Para os demais termos segue que

$$\begin{aligned} &\langle \psi_a | \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_b \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y) = \\ &= \langle \psi_a | C_3^{-1} \left[C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} \right] C_3 | \psi_b \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y) = \\ &= e^{\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{-i4\pi}{3}} \langle \psi_a | \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_b \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x - iq_y), \end{aligned} \quad (2.46)$$

e

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_b | \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_a \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x + iq_y) = \\
& = \langle \psi_b | C_3^{-1} \left[C_3 \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) C_3^{-1} \right] C_3 | \psi_a \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x + iq_y) = \\
& = e^{-\frac{i2\pi}{3}} e^{-\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{i4\pi}{3}} \langle \psi_b | \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_a \rangle \frac{-i\hbar^2}{m_e} (q_x + iq_y).
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Por se tratar de um operador Hermitiano temos que

$$\langle \psi_a | \frac{-i\hbar^2}{m_e} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_b \rangle = \langle \psi_b | \frac{-i\hbar^2}{m_e} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_a \rangle^*, \tag{2.48}$$

porém, $(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y}) = (\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y})^*$, logo estes termos são reais e iguais.

O termo H_0 é invariante sobre σ_v , pois ∇^2 não é alterado pela mudança de sinal em x e o potencial é invariante pela simetria da rede. Assim, temos

$$H_{aa}^0 = \langle \psi_a | \sigma_v^{-1} (\sigma_v H_0 \sigma_v^{-1}) \sigma_v | \psi_a \rangle = (i)(-i) \langle \psi_b | H_0 | \psi_b \rangle = H_{bb}^0. \tag{2.49}$$

Tomando $H_{aa}^0 = 0$ (redefinição do zero de energia) e $\langle \psi_b | \frac{-i\hbar^2}{m_e} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) | \psi_a \rangle = \hbar v_F$, o Hamiltoniano resultante é dado por

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F (q_x - iq_y) \\ \hbar v_F (q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}, \tag{2.50}$$

onde v_F é a velocidade de Fermi (NETO et al., 2009).

2.3.4 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com spin-órbita

Vamos agora incluir na equação de Schrödinger (2.25) o termo spin-órbita $H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla U$ e de forma análoga ao que foi feito na seção 2.3.1, derivar uma equação equivalente à Eq. (2.29).

Utilizando o teorema de Bloch (Apêndice A.6) temos que o Hamiltoniano é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \left[\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_e c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \right] + \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}). \tag{2.51}$$

Reescrevendo a equação de Schrödinger obtemos

$$(H_0 + H') \psi_{\mu, \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \left(E_{\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} \right) \psi_{\mu, \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \tag{2.52}$$

com

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \tag{2.53}$$

e

$$H' = \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{q} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_e c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \right). \tag{2.54}$$

2.3.5 Resolução por $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com spin

O acoplamento spin-órbita acrescenta um termo $\frac{\hbar}{4m_e c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})$ ao H_0 e o termo $\frac{\hbar^2}{4m_e c^2} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})$ à perturbação H' como mostrado nas Eqs. (2.53) e (2.54). Os demais termos são iguais aos derivados na seção 2.3.3, sendo os elementos de matriz diferentes de zero para estados de mesmo spin.

O termo $\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U$ pode ser reescrito em termos das componentes de spin, isto é,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial y} \mathbf{p}_z - \frac{\partial U}{\partial z} \mathbf{p}_y \right) \sigma_x, \quad (2.55)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial z} \mathbf{p}_x - \frac{\partial U}{\partial x} \mathbf{p}_z \right) \sigma_y, \quad (2.56)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} \mathbf{p}_y - \frac{\partial U}{\partial y} \mathbf{p}_x \right) \sigma_z. \quad (2.57)$$

Nestas expressões há um produto escalar de um operador que atua nos estados $\{\psi_a, \psi_b\}$ com um operador que atua no spin. De maneira análoga ao que foi feito na Eq. (2.37), a soma de (2.55) e (2.56) pode ser reescrita como

$$\left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x - i \mathbf{p}_y) \right] \cdot (-i \sigma_x \hat{y} + \sigma_y \hat{x}) \text{ ou} \quad (2.58)$$

$$\left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x + i \mathbf{p}_y) \right] \cdot (i \sigma_x \hat{y} + \sigma_y \hat{x}). \quad (2.59)$$

Usando que $\mathbf{p}_z$ e $\frac{\partial U}{\partial z}$ são invariantes pela rotação C_3 e as Eqs. (2.38)–(2.44) temos

$$C_3 \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right) C_3^{-1} = e^{\frac{-i4\pi}{3}} \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right), \quad (2.60)$$

$$C_3 \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right) C_3^{-1} = e^{\frac{i4\pi}{3}} \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right). \quad (2.61)$$

Dessa forma os elementos de matriz $\langle \psi_i | \frac{\hbar}{4m_e c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) | \psi_j \rangle$ são dados por

$$\begin{aligned} & \langle \psi_b | C_3^{-1} C_3 \left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x - i \mathbf{p}_y) \right] C_3^{-1} C_3 | \psi_a \rangle (-i \sigma_x + \sigma_y) = \\ & e^{\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{i2\pi}{3}} e^{\frac{-i4\pi}{3}} \langle \psi_b | \left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x - i \mathbf{p}_y) \right] | \psi_a \rangle (-i \sigma_x + \sigma_y), \end{aligned} \quad (2.62)$$

e

$$\begin{aligned} & \langle \psi_a | C_3^{-1} C_3 \left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x + i \mathbf{p}_y) \right] C_3^{-1} C_3 | \psi_b \rangle (i \sigma_x + \sigma_y) = \\ & e^{\frac{-i2\pi}{3}} e^{\frac{-i2\pi}{3}} e^{\frac{i4\pi}{3}} \langle \psi_a | \left[-\mathbf{p}_z \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial U}{\partial z} (\mathbf{p}_x + i \mathbf{p}_y) \right] | \psi_b \rangle (i \sigma_x + \sigma_y). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Logo, estes elementos são invariantes por rotação C_3 , com spins $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ e $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ respectivamente, pois

$$\langle\uparrow|(-i\sigma_x + \sigma_y)|\downarrow\rangle = -2i, \quad (2.64)$$

$$\langle\downarrow|(-i\sigma_x + \sigma_y)|\uparrow\rangle = (i - i) = 0, \quad (2.65)$$

$$\langle\uparrow|(i\sigma_x + \sigma_y)|\downarrow\rangle = (i - i) = 0, \quad (2.66)$$

$$\langle\downarrow|(i\sigma_x + \sigma_y)|\uparrow\rangle = 2i. \quad (2.67)$$

Podemos verificar, como feito para o termo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que os termos (2.62) e (2.63) são reais e iguais e os denotaremos por λ_R . Porém, como os estados $\{\psi_a, \psi_b\}$ são ímpares em z , uma vez que estes são formados por orbitais p_z , segue dos operadores em (2.55) e (2.56) serem ímpares que $\lambda_R = 0$.

O termo (2.57) é invariante por rotação pois este é $\left(\frac{\partial U}{\partial x}, \frac{\partial U}{\partial y}\right) \times (\mathbf{p}_x, \mathbf{p}_y) \cdot \sigma_z$, restando apenas os termos da diagonal dados por λ_a e λ_b da subrede. Aplicando-se a operação de reflexão verifica-se que esses termos de subrede são opostos $\lambda_a = -\lambda_b$.

O termo $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U$ também pode ser dividido em uma soma de termos x e y e um termo z dos operadores de spin, ou seja,

$$\frac{\partial U}{\partial z}(\mathbf{q}_x \sigma_y - i \mathbf{q}_y \sigma_x), \quad (2.68)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y}\right) \cdot (\mathbf{q}_y \hat{x} - i \mathbf{q}_x \hat{y}) \sigma_z \text{ ou} \quad (2.69)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y}\right) \cdot (\mathbf{q}_y \hat{x} + i \mathbf{q}_x \hat{y}) \sigma_z, \quad (2.70)$$

desconsiderando o vetor $\mathbf{q}_z$.

O termo $\frac{\partial U}{\partial z}$ é invariante por rotação, portanto

$$\langle\psi_a|C_3^{-1}C_3\left[\frac{\partial U}{\partial z}\right]C_3^{-1}C_3|\psi_b\rangle = e^{-i\frac{4\pi}{3}}\langle\psi_a|\frac{\partial U}{\partial z}|\psi_b\rangle = 0, \quad (2.71)$$

analogamente,

$$\langle\psi_b|\frac{\partial U}{\partial z}|\psi_a\rangle = 0. \quad (2.72)$$

Este operador também é ímpar na direção z , logo, deve ser nulo para todos os produtos internos nesta base. Aplicando o operador C_3 nos termos (2.69) (2.70) como feito para o termo $\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}$ na seção 2.3.3, obtém-se que o elementos diagonais na base $\{\psi_a, \psi_b\}$ são nulos e os demais são dados por

$$\langle\psi_b|\left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y}\right)|\psi_a\rangle = \langle\psi_a|\left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y}\right)|\psi_b\rangle = \hbar\nu'. \quad (2.73)$$

No entanto, ao se aplicar o operador $T \cdot M_y$, tem-se que esse termo se anula, uma vez que

$$T^{-1} \left(\frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial U}{\partial y} \right) T = \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right), \quad (2.74)$$

e que M_y adiciona um sinal negativo na componente y , mas perde ao se aplicar M_y^{-1} , $\langle \psi_b |$ contribui com uma fase (-1) e $|\psi_a\rangle$ com uma fase (1) , logo

$$\langle \psi_a | \left(\frac{\partial U}{\partial x} - i \frac{\partial U}{\partial y} \right) | \psi_b \rangle = -\hbar\nu' = \hbar\nu' = 0. \quad (2.75)$$

A representação do Hamiltoniano do grafeno na base $\{\psi_a \otimes |\uparrow\rangle, \psi_b \otimes |\uparrow\rangle, \psi_a \otimes |\downarrow\rangle, \psi_b \otimes |\downarrow\rangle\}$ levando em conta a interação spin-órbita é dada por

$$H = \lambda_\mu s_z \otimes \sigma_z + \hbar v_F s_0 \otimes \sigma \cdot \mathbf{q}, \quad (2.76)$$

com $\mu = \{a, b\}$.

2.4 Método dos invariantes

O Hamiltoniano do sistema deve ser invariante perante as operações de simetria que preservam a rede cristalina e definem o grupo da equação de Schrödinger. Assim, pode-se obter modelos efetivos escolhendo uma base para as representações e utilizando que o Hamiltoniano comute com estas operações. Nesta seção será ilustrado como isso é feito para o grafeno sem spin-órbita. E depois será apresentado como fazer o mesmo usando o pacote QSymm, sendo que neste caso já incluiremos spin-órbita.

2.4.1 Modelo efetivo para grafeno via método dos invariantes

Como já abordado na Seção 2.2.1 um operador de simetria T comuta com um Hamiltoniano que possui tal simetria, isto é,

$$THT^{-1} = H. \quad (2.77)$$

É conhecido de álgebra linear e pode-se mostrar que no lado esquerdo da Eq. (2.77), as matrizes T e T^{-1} são matrizes de mudança de base em que

$$T : \psi \rightarrow T(\psi(\mathbf{r})) \quad (2.78)$$

$$T^{-1} : T(\psi) \rightarrow \psi. \quad (2.79)$$

Dessa maneira, os vetores da base de H no lado esquerdo de (2.77) serão denotados por H^e e são o resultado da aplicação de $T^{-1}(\psi)$ nos vetores da base do lado direito, ou seja,

$$\begin{aligned} TH^eT^{-1} : \psi &\rightarrow H(\psi) \\ \Rightarrow TH^e : T^{-1}(\psi) &\rightarrow H(\psi) \\ \Rightarrow H^e : T^{-1}(\psi) &\rightarrow T^{-1}(H(\psi)). \end{aligned} \quad (2.80)$$

Como uma aplicação linear T^{-1} em uma função é equivalente a aplicação da sua inversa t no domínio da função (FAZZIO, 2009), segue que

$$H^e : \psi(t(\mathbf{r})) \rightarrow H(\psi(t(\mathbf{r}))). \quad (2.81)$$

De uma operação linear em um espaço $\mathbb{R}^3$ ser equivalente a inversa no seu dual (BIR; PIKUS, 1974) obtém-se

$$TH(t^{-1}(\mathbf{k}))T^{-1} = H(\mathbf{k}). \quad (2.82)$$

Dado que H é uma matriz de funções de $\mathbf{k}$, esta pode ser expandida e truncada até o termo de linear em $\mathbf{k}$, obtendo-se assim que

$$H = H_0 + M_x k_x + M_y k_y, \quad (2.83)$$

onde M_x e M_y são dados por

$$M_x = a_0 \sigma_0 + a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z, \quad (2.84)$$

$$M_y = b_0 \sigma_0 + b_1 \sigma_x + b_2 \sigma_y + b_3 \sigma_z \quad (2.85)$$

e consideramos apenas o Hamiltoniano no plano xy .

Substituindo a Eq. (2.83) no Hamiltoniano dos lados esquerdo e direito da Eq. (2.82), espera-se os mesmos coeficientes em M_x e M_y para ambos os lados, pois o sistema é o mesmo ao se aplicar uma operação de simetria. Portanto, o Hamiltoniano procurado é o que satisfaz

$$C_3(H_0 + M_x C_3^{-1}(k_x) + M_y C_3^{-1}(k_y))C_3^{-1} = H_0 + M_x k_x + M_y k_y, \quad (2.86)$$

$$\sigma_v(H_0 + M_x \sigma_v^{-1}(k_x) + M_y \sigma_v^{-1}(k_y))\sigma_v^{-1} = H_0 + M_x k_x + M_y k_y. \quad (2.87)$$

Para resolver estas equações é necessário encontrar como as matrizes dos operadores alteram as matrizes de Pauli. Efetuando estes produtos matriciais para o operador C_3 segue que

$$C_3 \sigma_x C_3^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\phi} \\ e^{2i\phi} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

$$C_3 \sigma_y C_3^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-2i\phi} \\ ie^{2i\phi} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.89)$$

$$C_3 \sigma_z C_3^{-1} = \sigma_z. \quad (2.90)$$

Efetuada a mesma análise para o operador $\sigma_v = -\sigma_y$ obtemos

$$\sigma_v \sigma_0 \sigma_v^{-1} = \sigma_0, \quad (2.91)$$

$$\sigma_v \sigma_x \sigma_v^{-1} = -\sigma_x, \quad (2.92)$$

$$\sigma_v \sigma_y \sigma_v^{-1} = \sigma_y, \quad (2.93)$$

$$\sigma_v \sigma_z \sigma_v^{-1} = -\sigma_z. \quad (2.94)$$

As representações dos operadores $C_3(z)$ e σ_v no espaço recíproco são iguais a do seu dual $\mathbb{R}^3$, expressas nas equações (2.35), (2.36). Substituindo estas e as equações de (2.91) até (2.94) na equação (2.87) temos

$$\begin{aligned}\sigma_v H' \sigma_v^{-1} &= (a_0 \sigma_0 - a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y - a_3 \sigma_z)(-k_x) \\ &= (a_0 \sigma_0 + a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z)(k_x),\end{aligned}\quad (2.95)$$

$$\begin{aligned}\sigma_v H' \sigma_v^{-1} &= (b_0 \sigma_0 - b_1 \sigma_x + b_2 \sigma_y - b_3 \sigma_z)(k_y) \\ &= (b_0 \sigma_0 + b_1 \sigma_x + b_2 \sigma_y + b_3 \sigma_z)(k_y),\end{aligned}\quad (2.96)$$

implicando que $a_0 = a_2 = b_1 = b_3 = 0$.

Calculando $C_3 H' C_3^{-1} = H$ temos

$$\begin{aligned}&\left[a_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] (\cos(\phi)k_x - \sin(\phi)k_y) \\ &+ \left[b_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + b_2 \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \right] (\sin(\phi)k_x + \cos(\phi)k_y) = H,\end{aligned}\quad (2.97)$$

o que implica em

$$\Rightarrow \left[a_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} (\cos(\phi)) + b_2 \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} (\sin(\phi)) \right] k_x = a_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} k_x, \quad (2.98)$$

$$\Rightarrow \left[-a_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} (\sin(\phi)) + b_2 \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} (\cos(\phi)) \right] k_y = b_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} k_y. \quad (2.99)$$

É notório que em ambas as equações matriciais os elementos não nulos são conjugados entre si. Desenvolvendo o termo não nulo da primeira linha da Eq. (2.98) tem-se que

$$a_1 [\cos(\phi) + \sin(\phi)i] \cos(\phi) + b_2 [\sin(\phi) - \cos(\phi)i] \sin(\phi) = a_1 \Rightarrow b_2 = a_1. \quad (2.100)$$

De maneira análoga para a Eq. (2.99) segue que

$$a_1 [-\cos(\phi) - \sin(\phi)i] \sin(\phi) + b_2 [\sin(\phi) - \cos(\phi)i] \cos(\phi) + i = 0 \Rightarrow b_2 = a_1. \quad (2.101)$$

Portanto, o Hamiltoniano final, tomando $a_1 = \hbar v_F$, é

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k}. \quad (2.102)$$

O mesmo resultado obtido via o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, com $\mathbf{k} = \mathbf{q}$.

2.4.2 Pacote Python Qsymm

Há um pacote aberto para a linguagem Python capaz de efetuar análises de simetria para um Hamiltoniano, este é o *Qsymm*. Como mostrado a seguir, é possível reproduzir o método dos invariantes em poucas linhas de código. Para este será usado as representações 2.13 e 2.14.

```

1 import numpy as np
2 import qsymm
3
4 #Matrizes de Pauli:
5 s0 = np.array([[1, 0],[0, 1]])
6 sx = np.array([[0, 1],[1, 0]])
7 sy = np.array([[0, -1j],[1j, 0]])
8 sz = np.array([[1, 0],[0, -1]])
9
10 #Representacao da rotacao C3 para os estados:
11 C3 = np.cos(2 * np.pi/3)*s0 + 1j*np.sin(2 * np.pi/3)*sz
12
13 #Representacao da reflexao Mx para os estados:
14 Mx = - sy
15
16 #Simetrias criadas pelos operadores anteriores:
17 Rotation = qsymm.rotation(1/3, U=C3)
18 Mirror = qsymm.mirror([1,0], U=Mx)
19
20 #Hamiltoniano linear:
21 H0 = qsymm.continuum_hamiltonian(symmetries=[Mirror, Rotation], dim=2,
    total_power=1, prettify=True)
22 qsymm.display_family(H0, summed=True)

```

Listagem 2.1 – Código para o hamiltoniano linear em K do grafeno.

Por meio dos operadores (2.21), (2.22), (2.23) e (2.24), o Hamiltoniano para o grafeno com spin utilizando a biblioteca *Qsymm* e tomando $c_0 = -c_1$ é dado por

$$H = c_0 s_z \otimes \sigma_z + c_3 s_0 \otimes \sigma \cdot \mathbf{k}. \quad (2.103)$$

com $c_0 = \lambda_a$ o acoplamento spin órbita entre os estados de mesma subrede e $c_3 = \hbar v_F$, em que v_F é a velocidade de Fermi. Esse é o mesmo resultado obtido em (2.76) pelo método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

2.5 Confinamento via massas de Wilson

Um modelo de bulk é aquele em que a rede cristalina do material é infinita, este é o considerado até aqui. Modelos reais possuem a rede cristalina finita, com as diferentes

bordas para a rede caracterizando o tipo do confinamento, que deve-se considerar na obtenção do Hamiltoniano efetivo.

Uma maneira de alcançar o efeito do confinamento a partir do hamiltoniano de bulk é adicionar um potencial $H_c = \alpha M_c \Theta(|\epsilon| - \epsilon_0)$ para se obter a ausência do potencial da rede. Obtendo, como nas Ref. (MCCANN; FAL'KO, 2004; RESENDE et al., 2017; ARAÚJO et al., 2019), que a condição de contorno para esta metodologia é

$$(\pm i M_c + M_c) \psi(\epsilon_0) = 0 \quad (2.104)$$

com M_c proveniente do termo linear do Hamiltoniano. Estas restrições possuem uma dificuldade para implementação numérica de grandezas associadas ao transporte (HERNÁNDEZ; LEWENKOPF, 2012), pois ao se discretizar a derivada $\frac{\partial}{\partial x}$ de forma simétrica para que esta seja Hermitiana, obtém-se que

$$k_x \psi(x) = -i \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{-i}{2a} [\psi_{n+1} - \psi_{n-1}], \quad (2.105)$$

ou utilizando a linguagem de segunda quantização, segue que

$$k_x = \frac{-i}{2a} [c_n^\dagger c_{n+1} - c_n^\dagger c_{n-1}]. \quad (2.106)$$

Aplicando-se a transformada de Fourier em

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikx_n}, \quad (2.107)$$

obtém-se que

$$H = \sum_k [\hbar v_f \sigma_x \frac{\sin(ka)}{a}] c_k^\dagger c_k, \quad (2.108)$$

o que é um problema na obtenção de grandezas de transporte, uma vez que terão contribuições extras para níveis de energia próximos de zero, devido a $\sin(\pi) = 0$; esse é o "Fermion Doubling Problem". Uma maneira de resolver isto é acrescentar um termo quadrático à solução linear conhecida, isto é,

$$H = \hbar v_f \sigma_x k_x + m \sigma_w k_x^2. \quad (2.109)$$

Aplicando a transformada de Fourier no Hamiltoniano (2.109), este pode ser expresso como

$$H = \sum_k [\hbar v_f \sigma_x \frac{\sin(ka)}{a} + m \sigma_w \frac{2}{a^2} [1 - \cos(ka)]] c_k^\dagger c_k, \quad (2.110)$$

assim, para $ka = \pi$, este não é zero.

Além de resolver este problema, o acréscimo deste termo pode substituir H_c na descrição do confinamento, como proposto e obtido nas Ref. (ARAÚJO et al., 2019; RESENDE et al., 2017), pode-se utilizar o modelo com a massa de Wilson ($H_c + w M_w k^2$) com a condição de que $\psi = 0$ nas bordas e $M_c = M_w$.

2.5.1 Massas de Wilson para nanofitas de grafeno

Como na Ref. (ARAÚJO et al., 2019), vamos obter o termo da massa de Wilson H_w para os confinamentos armchair e zigzag do grafeno utilizando as condições de contorno de Brey e Fertig (BREY; FERTIG, 2006), que dizem que os estados ψ devem desaparecer nos sítios removidos pelo confinamento.

Como os estados ψ_a e ψ_b possuem contribuições de sítios que já não pertencem mais a rede, uma expansão dos estados do confinamento na base $\{\psi_a, \psi_b, \psi'_a, \psi'_b\}$ como na equação (2.10), possuem coeficientes não constantes, como segue

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} [f_{\mu}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}u_{\mu}(\mathbf{r}) + f_{\mu'}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}}u_{\mu'}(\mathbf{r})] \quad (2.111)$$

com $\mu = \{a, b\}$, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ e $\mathbf{q}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}'$.

Para os estados nos sítios $\mathbf{R}_{\pm} = (\pm W/2, y)$ do confinamento zigzag Fig. 6, segue que $\psi(\mathbf{R}_{\pm}) = 0$ com $u_B(\mathbf{R}_{-}) \approx 0$, $u_A(\mathbf{R}_{+}) \approx 0$, uma vez que os orbitais p_z são altamente localizados, implicando que

$$f_A(\mathbf{R}_{-})e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_{-}}u_A(\mathbf{R}_{-}) + f_{A'}(\mathbf{R}_{-})e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_{-}}u_{A'}(\mathbf{R}_{-}) = 0 \quad (2.112)$$

$$f_B(\mathbf{R}_{+})e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_{+}}u_B(\mathbf{R}_{+}) + f_{B'}(\mathbf{R}_{+})e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_{+}}u_{B'}(\mathbf{R}_{+}) = 0, \quad (2.113)$$

usando que as projeções das fases em x são iguais e que os orbitais também, ou seja, $e^{iK_x\cdot\mathbf{R}_{-}}u_A(\mathbf{R}_{-}) = e^{iK'_x\cdot\mathbf{R}_{-}}u_{A'}(\mathbf{R}_{-})$ e $e^{iK_x\cdot\mathbf{R}_{+}}u_B(\mathbf{R}_{+}) = e^{iK'_x\cdot\mathbf{R}_{+}}u_{B'}(\mathbf{R}_{+})$, obtém-se que

$$f_A(-\frac{W}{2}) = -f_{A'}(-\frac{W}{2}) \quad (2.114)$$

$$f_B(+\frac{W}{2}) = -f_{B'}(+\frac{W}{2}). \quad (2.115)$$

Para as nanofitas armchair, confinadas na direção y conforme ilustrado na Fig. 7, diferente do caso anterior, há orbitais A e B nos sítios em um mesmo extremo. Portanto a restrição $\psi(\mathbf{R}_{\pm}) = 0$ implica em

$$\sum_{\mu} [f_{\mu}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}u_{\mu}(\mathbf{r}) + f_{\mu}e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}}u_{\mu'}(\mathbf{r})] = 0 \quad (2.116)$$

com $y = \pm L/2$. Como $u_{\mu}(\mathbf{r})$ é L.I, segue que

$$f_{\mu}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}u_{\mu}(\mathbf{r}) + f_{\mu}e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}}u_{\mu'}(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.117)$$

Tomando $f_{\mu}(\pm L/2) = e^{ik_x x} f_{\mu}(y)$, resulta-se que

$$f_{\mu'}(\pm L/2)e^{iK_y L/2}u_{\mu'}(r) + f_{\mu}(\pm L/2)e^{-iK_y L/2}u_{\mu}(r) = 0 \quad (2.118)$$

$$\Rightarrow f_{\mu}(\pm L/2) = -e^{\pm i\theta} f_{\mu'}(\pm L/2) \quad (2.119)$$

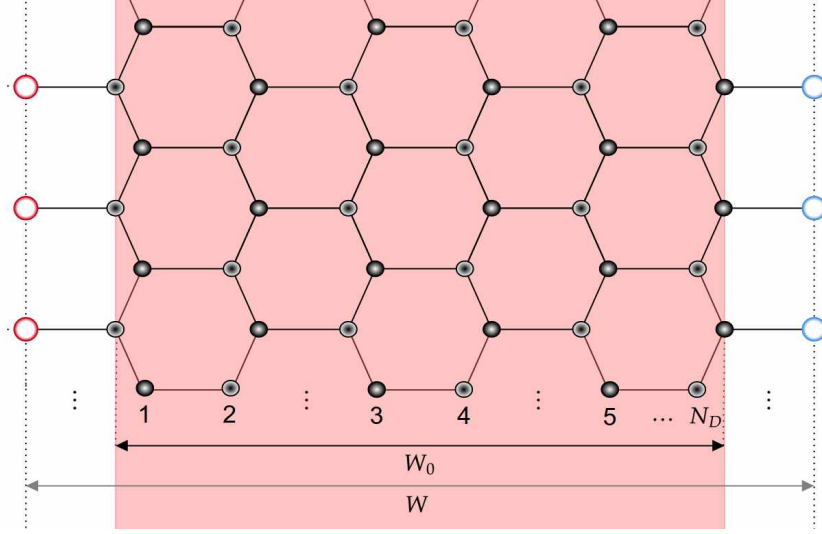


Figura 6 – Grafeno com laterais em um confinamento a zigzag. Com N_D átomos nas bordas, as dimensões para este são $W = W_0 + 2a/\sqrt{3}$ onde $W_0 = (3N_D/2)a/\sqrt{3}$, e $a/\sqrt{3} \approx 0.142nm$.

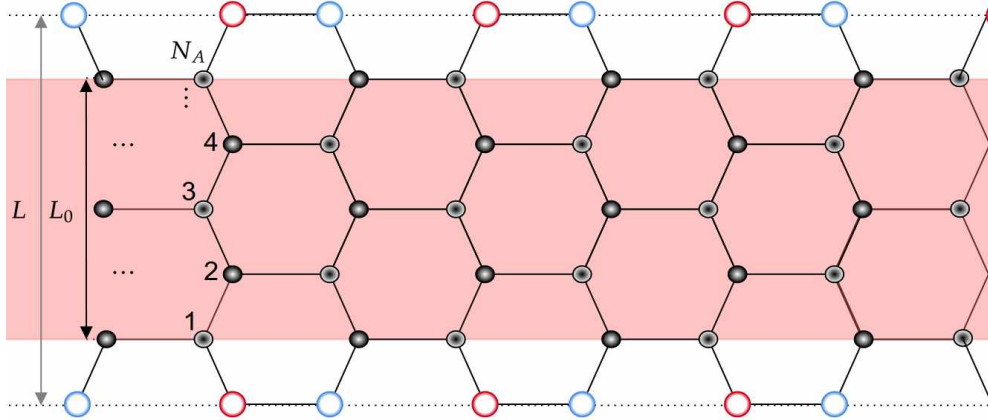


Figura 7 – Grafeno em um confinamento armchair em seus extremos superior e inferior. Com N_A átomos nas bordas, as dimensões para estas são $L = L_0 + a$, onde $L_0 = (N_A - 1)a/2$ e $a/\sqrt{3} \approx 0.142nm$.

onde $e^{\pm i\theta} = e^{iK_y L} u_{\mu'}(x, \pm L/2) / u_{\mu}(x, \pm L/2)$.

Utilizando as matrizes obtidas pelas condições de contorno de Berry e Mondragon na Ref. (ARAÚJO et al., 2019) para nanofitas em zigzag temos

$$U_k^Z = \tau_0 \otimes \sigma_x \quad (2.120)$$

$$U_C^Z(\eta) = \tau_0 \otimes (\sigma_y \eta) + \tau_x \otimes \sigma_y (1 - \eta). \quad (2.121)$$

E para as nanofitas airmchair estas são dadas por

$$U_k^A = \tau_z \otimes \sigma_y \quad (2.122)$$

$$U_c^A(\theta) = \tau_0 \otimes \sigma_y \cot(\theta) + \tau_x \otimes \sigma_y \csc(\theta). \quad (2.123)$$

O caso em que estas restrições são iguais as Eq. (2.114), (2.118) são obtidos para $\eta = \{0, 1\}$, porém, para o caso $\eta = 0$, obtém-se novas restrições $f_B(\mathbf{R}_-) = f_B(\mathbf{R}_-)$, e $f_A(\mathbf{R}_+) = f_{A'}(\mathbf{R}_+)$, que implicam em $\phi_A(\mathbf{R}_+) = 0$ e $\phi_B(\mathbf{R}_-) = 0$.

Obtida a massa de Wilson associada a cada confinamento pode-se descrever o Hamiltoniano com boa precisão, para os casos de confinamento de nanofitas de grandes dimensões considerando devido aos estados serem combinações lineares de orbitais doo Hamiltoniano linear de bulk, este é o modelo mínimo.

3 Resultados

Aplicaremos os fundamentos apresentados no capítulo anterior para estudar os estados de borda pseudo-hélicos introduzidos por (FRANK et al., 2018). Nesta referência os autores usam o método *tight-binding*. Aqui, reproduziremos resultados equivalentes via método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ utilizando condições de contorno introduzidas via massas de Wilson, como descrito na Ref. (ARAÚJO et al., 2019).

3.1 Grafeno com simetria quebradas pelo substrato

O sistema considerado por (FRANK et al., 2018) é uma folha de grafeno sobre um substrato que induz quebras de simetria de subrede e intensifica o acoplamento spin-órbita por efeitos de proximidade. Nesta seção apresentamos o grupo de simetria reduzido e as representações relevantes. Aplicamos o método dos invariantes via pacote Python Qsymm para obter o modelo efetivo e associamos os coeficientes a elementos de matriz de $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Para introduzir o confinamento e gerar nanofitas e/ou nanoflocos, consideraremos o conceito de “modelo mínimo” introduzido por Ref. (ARAÚJO et al., 2019), onde o Hamiltoniano até ordem linear em k é o mesmo da folha infinita e os termos k^2 são as massas de Wilson necessárias para regularizar as condições de contorno.

3.1.1 Grupo de simetria e representações

A quebra de simetria de subrede implica em estados distintos para sítios de diferentes subredes, portanto os operadores de simetria restantes são aqueles invariantes nas subredes. Estes são uma rotação C_3 de um ângulo $\phi = \frac{2\pi}{3}$ e o operador $T \cdot M_y$, que é o resultado do produto do operador de reversão temporal e o de reflexão no eixo y . A representação na base $\{\psi_a(\mathbf{r}), \psi_b(\mathbf{r}), \psi'_a(\mathbf{r}), \psi'_b(\mathbf{r})\}$ para estes operadores são

$$D^\psi(T \cdot M_y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

para ambos os estados K e K' , e para os pontos simetria K , o operador C_3 é a mesma que (2.13) Para os pontos K' , este é representado como segue

$$\begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi}{3}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{2\pi}{3}} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

No espaço de spin os operadores possuem as representações

$$D^{spin}(T \cdot M_y) = i s_y \cdot e^{-\frac{i}{2}\pi s_y} \quad (3.3)$$

$$D^{spin}(C_3) = e^{-\frac{i}{2}\frac{2\pi}{3}s_z}. \quad (3.4)$$

3.1.2 Modelo efetivo

Aplicando o método dos invariantes com este grupo de simetria obtém-se o Hamiltoniano para o ponto K na base $\{\psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle\}$, dado por

$$H = \begin{pmatrix} \delta + \lambda_a & \hbar v_F k_x - i\hbar v_F k_y & 0 & 2i\lambda_R \\ \hbar v_F k_x + i\hbar v_F k_y & -\delta - \lambda_b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta - \lambda_a & \hbar v_F k_x - i\hbar v_F k_y \\ -2i\lambda_R & 0 & \hbar v_F k_x + i\hbar v_F k_y & -\delta + \lambda_b \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Para o ponto K' o Hamiltoniano na base $\{\psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\uparrow\rangle, \psi_a(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle, \psi_b(\mathbf{r}) \otimes |\downarrow\rangle\}$ é dado por

$$H = \begin{pmatrix} \delta - \lambda_a & \hbar v_F k_x + i\hbar v_F k_y & 0 & 0 \\ \hbar v_F k_x - i\hbar v_F k_y & -\delta + \lambda_b & 2i\lambda_R & 0 \\ 0 & -2i\lambda_R & \delta + \lambda_a & \hbar v_F k_x + i\hbar v_F k_y \\ 0 & 0 & \hbar v_F k_x - i\hbar v_F k_y & -\delta - \lambda_b \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Resultado que pode ser obtido pelo método kp. Com a quebra de simetria de subrede há ausência das simetrias de reflexão σ_v e σ_h implicando no aparecimento dos termos (2.62) e (2.63), na distinção de λ_a e λ_b do termo (2.57) e dos elementos diagonais de (2.49), estes em específico eram iguais, portanto, tal termo $H_{aa} = H_{bb}$ era uma constante adicionada a energia, podendo ser tomado zero ao se definir o nível zero de energia, mas agora não mais. Definindo o nível zero de energia $E_0 = (H_{aa} + H_{bb})/2$, segue que $H_{aa} - E_0 = (H_{aa} - H_{bb})/2 = \delta$ e $H_{bb} - E_0 = (-H_{aa} + H_{bb})/2 = -\delta$ como expresso nas equações 3.5 e 3.6.

Ao se quebrar a simetria σ_h , o termo 2.68 retorna para elementos de matriz com estados de uma mesma subrede e spins opostos, porém estes são zeros, pois

$$\frac{\partial U}{\partial z} = -\frac{i}{\hbar} [U, p_z] = -\frac{i}{\hbar} [(H_0 - H_{SO}^z), p_z] = -\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{p^2}{2m_e} + U \right), p_z \right], \quad (3.7)$$

com H_0 por definição o termo diagonal dos hamiltonianos 3.5 e 3.6 na base escolhida para $k = 0$, e $H_{SO}^z = \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} p_z [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})]_z$, logo

$$\begin{aligned} \langle \psi_\mu | \frac{\partial U}{\partial z} | \psi_\mu \rangle &= -\frac{i}{\hbar} (\langle \psi_\mu | (H_0 - H_{SO}^z) p_z | \psi_\mu \rangle - \langle \psi_\mu | p_z (H_0 - H_{SO}^z) | \psi_\mu \rangle) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_\mu | (\epsilon_0 - \epsilon_0) p_z | \psi_\mu \rangle = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

com $\epsilon_0 = \delta$ para $\mu = a$ e $\epsilon_0 = -\delta$ para $\mu = b$.

3.1.3 Massas de Wilson

O modelo mínimo é definido pelos termos lineares em k nas equações (3.5) e (3.6) e as massas de Wilson que serão deduzidas aqui. A ideia deste modelo mínimo é que para

nanofitas ou nanoflocos grandes o suficiente, o H da folha infinita deve ser dominante. Correções do tamanho finito e confinamento devem aparecer apenas nas massas de Wilson, pois estas são introduzidas para regularizar as condições de contorno.

Analisando o Hamiltoniano obtido pela soma direta dos operadores Eq. (3.5) e Eq. (3.6), observa-se que os termos lineares em $\mathbf{k}$ são

$$\tau_0 \otimes s_0 \otimes \sigma_x k_x, \quad (3.9)$$

$$\tau_z \otimes s_0 \otimes \sigma_y k_y, \quad (3.10)$$

cujos dois primeiros fatores são devidos respectivamente a $\mathbf{k}$ e o spin, invertendo a ordem destes, obtém-se os termos lineares

$$s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x k_x, \quad (3.11)$$

$$s_0 \otimes \tau_z \otimes \sigma_y k_y. \quad (3.12)$$

Tendo assim que suas matrizes para U_c^Z e U_c^A são as mesmas anteriores (2.121) e (2.123) para cada spin, tendo sua representação

$$U_c^Z = s_0 \otimes [\eta \tau_0 + (1 - \eta) \tau_x] \otimes \sigma_y, \quad (3.13)$$

$$U_c^A(\theta) = s_0 \otimes [\tau_0 \cot \theta + \tau_x \csc \theta] \otimes \sigma_y, \quad (3.14)$$

com $\eta = 0$ e $\theta = \frac{2\pi}{3}(N_A + 1) + \delta\theta$, e tipicamente $\delta\theta = 20^\circ$.

A quebra de simetria de subrede afeta os estados u_μ de (2.8) e (2.9), tornando estes distintos para diferentes $\mu = \{A, B\}$, tendo que os $\{\psi_a, \psi_b\}$ são distintos e linearmente independente, não ocasionando mudanças nas restrições (2.114) e (2.118). Como o nanofloco é apenas uma combinação dos dois confinamentos, seguem as mesmas massas de Wilson.

3.2 Nanofitas

As nanofitas são as estruturas obtidas ao se confinar em uma direção a rede cristalina considerada. Para o grafeno há dois tipos: a nanofita armchair e a zigzag, estes serão considerados a seguir.

3.2.1 Nanofitas tipo armchair

O modelo mínimo para este confinamento ilustrado na Fig. 7 é dado por

$$H = H_0 + U_k k + U_w k^2 \quad (3.15)$$

com H_0 e U_k obtidos através das equações 3.5 e (3.6), e U_w dada por (3.14), como segue

$$\begin{aligned}
 H = & [\Delta(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_z) - \lambda_r(s_y \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x + s_x \otimes \tau_z \otimes \sigma_y) + \\
 & (s_z \otimes \tau_z \otimes ((\lambda_A/2)(\sigma_0 + \sigma_z) + (\lambda_B/2)(\sigma_z - \sigma_0))) - \\
 & \hbar\nu D_k(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_y)] + \\
 & \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x)\mathbf{k}_x + \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_z \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_y + \\
 & m_w(s_0 \otimes (\cot(\theta)\tau_0 + \csc(\theta)\tau_x) \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_y^2.
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Discretizando os termos dependentes de $\mathbf{k}$, com $\mathbf{k}_y$ dado pelo operador $\frac{\partial}{\partial y}$ e $\mathbf{k}_x$ como um parâmetro, será aplicado o método de diferenças finitas Ref. (IZAAC; WANG, 2018) para se obter as bandas de energia do sistema de confinamento Armchair 7. Porém, para este caso os estados da borda spin polarizados são simétricos ou antissimétricos, sendo difícil a plotagem isoladas destes estados. Para contornar este problema será aplicado um pequeno campo elétrico constante, que não perturbe muito o sistema, mas que seja suficiente para quebrar a simetria entre as bordas, separando os estados simétricos e antissimétricos, tornando possível identificar os estados de borda. Como é feito no código D.1, utilizando os recursos das bibliotecas *numpy* e *matplotlib*, gerando as figuras 8a e 8b.

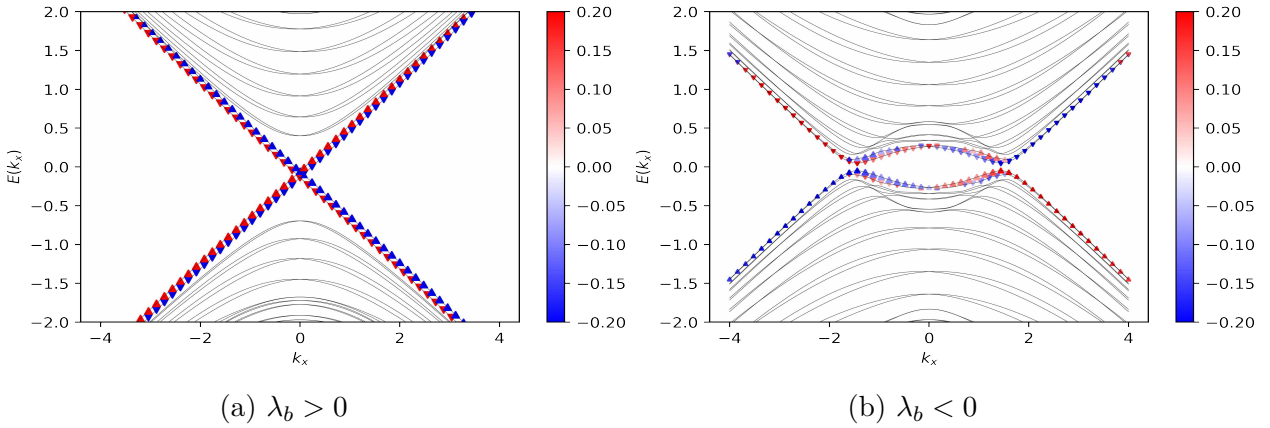


Figura 8 – Bandas de energia para o grafeno com quebra de simetria de subrede com confinamento Armchair. Com diferentes cores para estados com diferentes spins e diferentes símbolos para bordas diferentes. (a) Caso com o termo de hopping do acoplamento spin positivo para a subrede B. (b) Caso com o termo de hopping do acoplamento spin negativo para a subrede B.

Na figura 8a os estados em uma mesma borda possuem spin e direção propagação opostas como o esperado para estados hélicos. Na figura 8b os spins não são bem definidos para um mesmo estado, mesmo com a aplicação do campo elétrico, isso é esperado vide o resultado de (FRANK et al., 2018), pois os estados não são bem definidos na borda Armchair tendo que em algum trecho no centro da rede, os estados de um extremo da borda tunelam para a outra com uma troca de spin.

3.2.2 Nanofitas tipo zigzag

O modelo mínimo para este confinamento é dado por

$$H = H_0 + U_k k + U_w k^2 \quad (3.17)$$

com H_0 e U_k dados pelas equações 3.5 e 3.6, e U_w dada por 3.13, como segue

$$\begin{aligned} H = & [\Delta(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_z) - \lambda_r(s_y \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x + s_x \otimes \tau_z \otimes \sigma_y) + \\ & (s_z \otimes \tau_z \otimes ((\lambda_A/2)(\sigma_0 + \sigma_z) + (\lambda_B/2)(\sigma_z - \sigma_0))) - \\ & \hbar\nu D_k(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_y)] + \\ & \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x)\mathbf{k}_x + \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_z \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_y + \\ & m_w(s_0 \otimes [\eta\tau_0 + (1 - \eta)\tau_x] \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_x^2. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Discretizando os termos dependentes de $\mathbf{k}$, com $\mathbf{k}_x$ dado pelo operador $\frac{\partial}{\partial x}$ e $\mathbf{k}_y$ como um parâmetro, aplicando diferenças finitas como segue no código D.2 obtém-se as bandas de energia do sistema representado na Fig. 6.

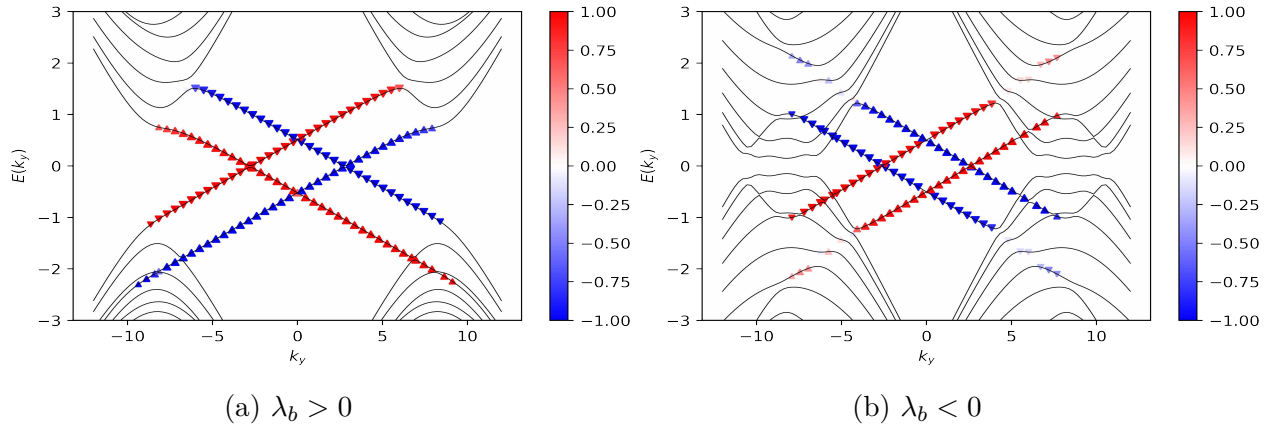
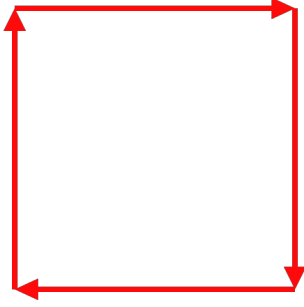


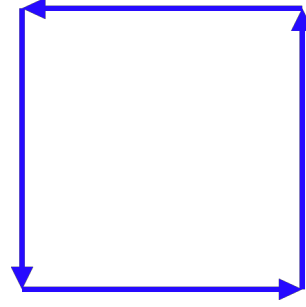
Figura 9 – Bandas de energia para o grafeno com quebra de simetria de subrede com confinamento ZigZag. Com diferentes cores para estados com diferentes spins e diferentes símbolos para bordas diferentes. (a) Caso com o termo de hopping do acoplamento spin positivo para a subrede B. (b) Caso com o termo de hopping do acoplamento spin negativo para a subrede B.

Analisando a figura 9a, as bandas dos estados para um mesmo extremo do confinamento possuem derivadas com sinais opostos entre si e opostos com relação aos mesmos spins no outro extremo, como estes sinais definem a propagação de tais estados, estes são hélicos como também obtido na Ref. (FRANK et al., 2018). Com este resultado para este confinamento, e com o resultado já discutido para o caso armchair, a propagação dos estados de borda nos dois sentidos ao se considerar os dois confinamentos são expressas nas figuras 10a e 10b. Analisando de maneira análoga a figura 9b, observa-se os estados

pseudo-hélicos também obtidos na Ref. (FRANK et al., 2018). Estes estados pseudo-hélicos são como visto na figura 9b, com spins opostos e direções opostas em uma mesma borda, porém diferente dos estados de mesmo spin em diferentes bordas do caso hélico, estes possuem direções iguais. Com este resultado para este confinamento e o observado no caso armchair, a propagação dos estados de borda nos dois sentidos ao se considerar os dois confinamentos são expressas nas figuras 10a e 10b.

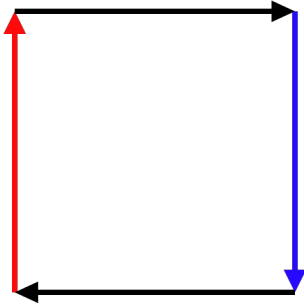


(a) Estado com propagação no sentido horário.

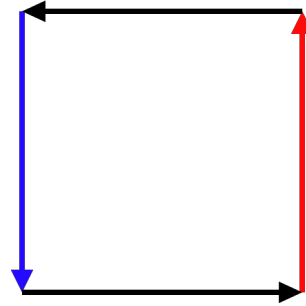


(b) Estado com propagação no sentido anti-horário.

Figura 10 – Representação por setas das direções de propagação das correntes de elétrons spin polarizados em um confinamento do tipo floco para o hamiltoniano dado por 3.5 e 3.6, com o termo de hopping do acoplamento spin positivo para a subrede B. A cor azul está associada ao spin down e a vermelha ao spin up.



(a) Estado com propagação no sentido horário.



(b) Estado com propagação no sentido anti-horário.

Figura 11 – Representação por setas das direções de propagação das correntes de elétrons spin polarizados em um confinamento do tipo floco para o hamiltoniano dado por 3.5 e 3.6, com o termo de hopping do acoplamento spin negativo para a subrede B. A cor azul está associada ao spin down, a vermelha ao spin up e a preta a um spin indefinido.

3.3 Nanofloco

O modelo mínimo para este confinamento é dado por

$$H = H_0 + U_k k + U_w k^2 \quad (3.19)$$

com H_0 e U_k dados pelas equações 3.5 e 3.6, e U_w dada por 3.13 e 3.14, como segue

$$\begin{aligned}
 H = & [\Delta(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_z) - \lambda_r(s_y \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x + s_x \otimes \tau_z \otimes \sigma_y) + \\
 & (s_z \otimes \tau_z \otimes ((\lambda_A/2)(\sigma_0 + \sigma_z) + (\lambda_B/2)(\sigma_z - \sigma_0))) - \\
 & \hbar\nu D_k(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_y)] + \\
 & \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_0 \otimes \sigma_x)\mathbf{k}_x + \hbar\nu(s_0 \otimes \tau_z \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_y + \\
 & m_w[(s_0 \otimes [\eta\tau_0 + (1-\eta)\tau_x] \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_x^2 + (s_0 \otimes (\cot(\theta)\tau_0 + \csc(\theta)\tau_x) \otimes \sigma_y)\mathbf{k}_y^2]. \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

Utilizando os recursos da biblioteca Kwant para construir o sistema com este Hamiltoniano (3.20) confinado nas duas direções Armchair e Zigzag com elétrodos no centro do confinamento Zigzag, foi plotado o mapa de cores com as densidades de estados e as densidades de correntes expressos na figura 13.

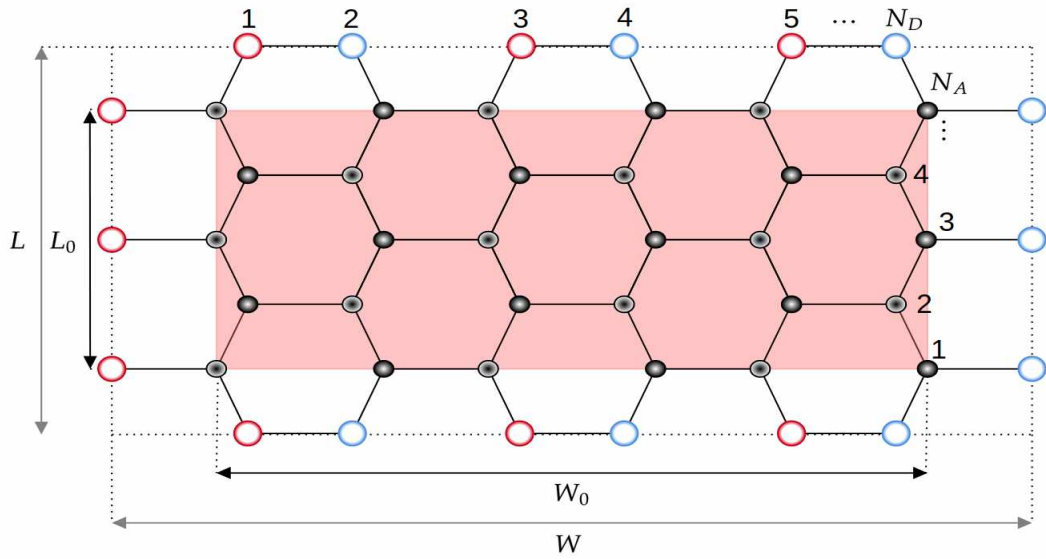


Figura 12 – Célula confinada em retângulo com laterais em um confinamento armchair e extremos superior e inferior com confinamento zigzag. Com N_D e N_A átomos nas bordas, as dimensões para este são $W = W_0 + 2a/\sqrt{3}$ e $L = L_0 + a$, onde $W_0 = (3N_D/2)a/\sqrt{3}$, $L_0 = (N_A - 1)a/2$ e $a/\sqrt{3} \approx 0.142nm$.

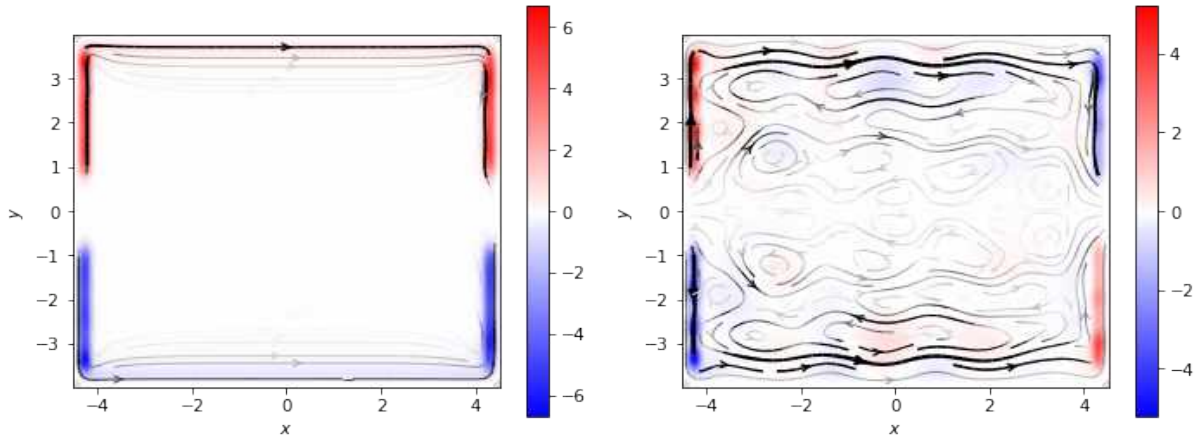


Figura 13 – Densidade de estados com cores distintas para diferentes spins e densidades de correntes representadas por setas. O sistema a esquerda é com $\lambda_b > 0$ e o a direita é com $\lambda_b < 0$.

Na figura 13 a direita, caso pseudo-hélico, são visíveis os estados com baixa polarização de spin na direção armchair, com sentido de propagação indefinidos enquanto que na direção Zigzag estes possuem sentidos e polarização de spin bem definidos. Sendo visível na parte superior e inferior a troca do sinal do spin ao tunelarem para o outro extremo. Na figura 13 à esquerda, se obteve os estados hélicos característicos do efeito Hall quântico de spin.

4 Conclusões e perspectivas

Com o objetivo principal de se obter o resultado da referência (FRANK et al., 2018), utilizando o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com condições de contorno via massas de Wilson, foi-se necessário um aprendizado amplo sobre teoria de grupos, porém, com o foco nas representações dos operadores no espaço dos estados de um hamiltoniano com e sem spin. Para que com as simetrias da rede cristalina e recíproca (conceitos fundamentais de estado sólido que foram estudados em um estagio inicial projeto), pudesse se obter o hamiltoniano efetivo e as condições de contorno para três tipos de confinamentos propostos via massas de Wilson. Abordagem justificada e descrita na referencia (ARAÚJO et al., 2019), que também foi devidamente estudada. Para se utilizar a metodologia proposta de maneira mais eficiente, o autor também estudou alguns dos recursos de duas bibliotecas científicas da linguagem de programação python, a *Qsymm* e a *kwant*. Por fim, conforme apresentado nos resultados, a utilização da metodologia $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ em um modelo mínimo conseguiu reproduzir os resultados obtidos na referência (FRANK et al., 2018), reforçando o uso do modelo mínimo para sistemas confinados.

Os conceitos apresentados neste trabalho serão aprofundados e utilizados para um futuro mestrado na área, em especial a biblioteca *kwant* que possui muitos recursos a serem explorados. Há ainda o interesse neste material, pois há propriedades de transporte não estudadas, que poderão ser feitas com uma melhor compreensão da biblioteca *kwant*, também há outras configurações de confinamentos ou aplicações em dispositivos que podem gerar resultados interessantes. Em particular, será interessante estudar e comparar a polarização de spin das correntes nos sistemas hélico e pseudo-hélico.

Referências

- ANDO, Y.; FU, L. Topological crystalline insulators and topological superconductors: From concepts to materials. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 6, n. 1, p. 361–381, mar. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031214-014501>.
- ARAÚJO, A. L. et al. Interplay between boundary conditions and wilson's mass in dirac-like hamiltonians. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 100, n. 20, nov. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevb.100.205111>.
- ASHCROFT, N.; MERMIN, N. *Solid State Physics*. Philadelphia: Saunders College, 1976.
- BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, dez. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1126/science.1133734>.
- BERNEVIG, B. A.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 10, mar. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.106802>.
- BIR, G.; PIKUS, G. *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*. Wiley, 1974. (A Halsted Press book). ISBN 9780470073216. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=38m2QgAACAAJ>.
- BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 73, n. 23, jun. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevb.73.235411>.
- COELHO, F. U.; LOURENÇO, M. L. *Um curso de álgebra linear*. [S.l.]: EDUSP, 2005.
- DRESSELHAUS G. DRESSELHAUS, A. M. *Group Theory Application to the Physics of Condensed Matter*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg: Springer, 2008.
- FAZZIO, W. *Introdução à teoria de grupos aplicada em moléculas e sólidos*. Campus Universitário Carnobi: Ed. da UFSM, 2009.
- FRANK, T. et al. Protected pseudohelical edge states in F_2 -trivial proximitized graphene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 120, p. 156402, Apr 2018. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.156402>.
- FRUCHART, M.; CARPENTIER, D. An introduction to topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, Elsevier BV, v. 14, n. 9-10, p. 779–815, nov. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2013.09.013>.
- FU, L.; KANE, C. L. Time reversal polarization and aZ2adiabatic spin pump. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 74, n. 19, nov. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevb.74.195312>.

- FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 76, p. 045302, Jul 2007. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.045302>.
- HALDANE, F. D. M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 61, n. 18, p. 2015–2018, out. 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.61.2015>.
- HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 82, n. 4, p. 3045–3067, nov. 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/revmodphys.82.3045>.
- HERNÁNDEZ, A. R.; LEWENKOPF, C. H. Finite-difference method for transport of two-dimensional massless dirac fermions in a ribbon geometry. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 86, n. 15, out. 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevb.86.155439>.
- HSIEH, D. et al. A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, Springer Science and Business Media LLC, v. 452, n. 7190, p. 970–974, abr. 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nature06843>.
- IZAAC, J.; WANG, J. *Computational Quantum Mechanics*. Springer International Publishing, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-99930-2>.
- JOSHI, A. *Elements of Group Theory for Physicists*. India: CWILEY EASERN LIMITED, 1982.
- KANE, C. L.; MELE, E. J. Z₂topological order and the quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 95, n. 14, set. 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.146802>.
- KLEIN, M. J. On a degeneracy theorem of kramers. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 20, n. 2, p. 65–71, fev. 1952. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.1933118>.
- KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 45, n. 6, p. 494–497, ago. 1980. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.45.494>.
- KONIG, M. et al. Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 318, n. 5851, p. 766–770, nov. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1126/science.1148047>.
- LAUGHLIN, R. B. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 23, p. 5632–5633, May 1981. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.5632>.
- MCCANN, E.; FAL'KO, V. I. Symmetry of boundary conditions of the dirac equation for electrons in carbon nanotubes. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 16, n. 13, p. 2371–2379, mar. 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/13/016>.

- MURAKAMI, S. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 301, n. 5638, p. 1348–1351, set. 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1087128>>.
- NETO, A. H. C. et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 81, n. 1, p. 109–162, jan. 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/revmodphys.81.109>>.
- NOVOSELOV, K. S. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 306, n. 5696, p. 666–669, out. 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.1102896>>.
- QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. The quantum spin hall effect and topological insulators. *Physics Today*, AIP Publishing, v. 63, n. 1, p. 33–38, jan. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3293411>>.
- RESENDE, B. M. de et al. Confinement and fermion doubling problem in dirac-like hamiltonians. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 16, out. 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.96.161113>>.
- THOULESS, D. J. et al. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 49, p. 405–408, Aug 1982. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>>.
- TINKHAM, M. *Group Theory and Quantum Mechanics*. East 2nd Street, Mineola, N.Y. 11501: Dover Publications, Inc, 2003.
- WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Physical Review*, American Physical Society (APS), v. 71, n. 9, p. 622–634, maio 1947. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.71.622>>.
- XIA, Y. et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 6, p. 398–402, maio 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1274>>.
- ZHANG, H. et al. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 6, p. 438–442, maio 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nphys1270>>.
- ZHANG, H.-J. et al. Electronic structures and surface states of the topological insulator $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 80, p. 085307, Aug 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.085307>>.
- ZHANG, S.-C. A four-dimensional generalization of the quantum hall effect. *Science*, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 294, n. 5543, p. 823–828, out. 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1126/science.294.5543.823>>.

Apêndices

APÊNDICE A – Teorema de Bloch

A definição da operação de translação sobre os vetores da rede de Bravais (B) é fechada na mesma. O hamiltoniano de uma rede infinita é invariante sobre estas operações, uma vez que qualquer ponto da rede é indistinguível. Portanto, há a garantia de que para estados $\psi(\mathbf{r})$, com $\mathbf{r}, \mathbf{R} \in B$

$$T_{\mathbf{R}}H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

ou para qualquer outra translação $\mathbf{R}' \in B$, obtendo que

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}'). \quad (\text{A.2})$$

Logo o conjunto destes operadores e o hamiltoniano constituem um grupo abeliano de matrizes, este que para um auto-espço qualquer há ao menos um autovetor comum aos demais operadores. Tomando ψ' um auto-estado simultâneo a estes, segue que

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi'(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}}a\psi'(\mathbf{r}) = ab\psi'(\mathbf{r}). \quad (\text{A.3})$$

Pode-se, associar os autovalores de tais operadores a uma função $c(\vec{R})$, tal que

$$c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}') = c(\mathbf{R} + \mathbf{R}'), \quad (\text{A.4})$$

a função que satisfaz esta condição é uma função exponencial, logo

$$c(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (\text{A.5})$$

demonstrando assim, o teorema de Bloch,

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})}\psi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.6})$$

Alternativamente, o teorema de Bloch pode ser escrito como

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.7})$$

sendo $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a parte periódica da função de onda. Define-se o termo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ como a fase de Bloch.

APÊNDICE B – Grupo duplo

Este tópicos pretende apresentar de maneira didática os conceitos necessários a cerca do grupo duplo. Informações mais gerais podem ser obtidas em (JOSHI, 1982), (FAZZIO, 2009), (TINKHAM, 2003) e (DRESSELHAUS G. DRESSELHAUS, 2008).

Definição 1 *Defini-se o grupo especial unitário $SU(2)$, como o grupo constituído pelo conjunto das matrizes unitárias de determinante 1 em $\mathbb{C}$, cujo a operação é a do produto matricial.*

A base para a representação bidimensional deste grupo adicionada da inversão são as matrizes de Pauli, sendo assim um grupo equivalente ao das operações no espaço de spin. A representação bidimensional generalizada para o $SU(2)$ é dada por

$$T = \begin{pmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

no qual esta atua em um espaço vetorial V qualquer, com o corpo dos complexos e de cardinalidade dois. Tal operação atuando sobre vetores (u, v) resulta em

$$\begin{pmatrix} u' & v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

$$\Rightarrow |u'|^2 + |v'|^2 = |u|^2 + |v|^2. \quad (\text{B.3})$$

Pode-se generalizar a representação deste grupo em um espaço de funções f_j^m com domínio V ,

$$f_j^m = \frac{u^{j+m} v^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}, \quad (\text{B.4})$$

com $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ e j um inteiro ou semi-inteiro. Tal que a operação $T(a, b)$ dada pela Eq. B.1 aplicada nestes vetores, atuam diretamente no domínio da função, como segue

$$T(a, b)f_j^m = \frac{1}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} (au + bv)^{j+m} (-b^*u + a^*v)^{j-m}. \quad (\text{B.5})$$

Expandindo o binômio e efetuando algumas mudanças de variáveis, obtém-se que elemento $D_{m'm}$ da matriz representação de $T(a, b)$ no espaço f_j^m é

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(a, b) = \sum_k \frac{[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{(j+m-k)!k!(j-m'-k)!(m'-m+k)!} \\ \times a^{j+m-k} (a^*)^{j-m'-k} b^k (-b^*)^{m'-m+k}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

com $k = j + m$ e $l = j - m$, o limite inferior para k é $m - m'$ se este for positivo, e 0 caso não seja, pois assim não haverá termos negativos para o fatorial no denominador. Analogamente seu limite superior é o menor valor entre $j + m$ e $j - m'$.

Definida a operação $T(a, b)$ sobre este espaço de funções, deve-se verificar que esta de fato é uma representação unitária e, que as representações obtidas são irredutíveis, para que este possa ser completamente descrito. Tomando a soma dos módulos quadrados dos vetores do espaço das funções, segue que

$$\sum_m |f_j^m|^2 = \sum_m \frac{|u^{j+m}v^{j-m}|^2}{(j+m)!(j-m)!} = \frac{1}{(2j)!} (|u|^2 + |v|^2)^{2j}, \quad (\text{B.7})$$

no qual utilizou-se a expansão binomial no segundo termo da expressão.

Para mostrar que tais representações são de fato irredutíveis, será mostrado que se as dadas representações $D^{(j)}(a, b)$ forem irredutíveis, então estas comutarão com uma matriz P , se e somente se P for uma matriz escalar. Sendo P uma matriz que comuta com as representações $D^{(j)}(a, b)$, pode-se diagonalizar P através de uma mudança de base no qual será denotado seus auto-valores por λ_i , segue que se

$$D_{m'm}^{(j)} P = P D_{m'm}^{(j)} \quad (\text{B.8})$$

$$\Rightarrow (D_{m'm}^{(j)})_{\mu\nu} \lambda_{\nu\nu} = \lambda_{\mu\mu} (D_{m'm}^{(j)})_{\mu\nu} \quad (\text{B.9})$$

$$\Rightarrow (D_{m'm}^{(j)})_{\mu\nu} [\lambda_{\nu\nu} - \lambda_{\mu\mu}] = 0. \quad (\text{B.10})$$

Assim, se $D_{m'm}^{(j)}$ for um conjunto de matrizes irredutíveis então $\lambda_{\nu\nu} = \lambda_{\mu\mu}$, porém se $D_{m'm}^{(j)}$ for redutível então $\lambda_{\nu\nu} = \lambda_{\mu\mu}$ ou $\lambda_{\nu\nu} \neq \lambda_{\mu\mu}$, logo, P deve ser apenas escalar.

Para verificar que $D^{(j)}(a, b)$ apenas comuta com P escalar, tomemos dois operadores destes fixos. No primeiro $a = e^{i\alpha/2}$, $b = 0$ com α real e $k = 0$, obtemos

$$D_{m'm}^{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) = \delta_{m'm} e^{im\alpha}. \quad (\text{B.11})$$

No segundo operador, tomemos $m' = j$, tendo assim, $k = 0$, obtendo

$$D_{jm}^{(j)}(a, b) = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!} \right]^{1/2} a^{j+m} (-b^*)^{j-m}. \quad (\text{B.12})$$

Na primeira operação pode-se verificar facilmente que $P_{lk} = p_l \delta_{lk}$, no qual ao aplicarmos este para a segunda operação obtemos $p_j D_{jm}^{(j)} = D_{jm}^{(j)} p_m$. Desde que $D_{jm}^{(j)}(a, b)$ não é o caso trivial, segue que $p_j = p_m$ implicando que P deve ser uma matriz escalar. Logo, construímos as $2j + 1$ representações irredutível para o grupo $SU(2)$ de operadores unitários de dois parâmetros com representações de determinante 1 e, para determinar os caracteres destas representações, é necessário determinar as classes dos operadores, que para isto, notemos que em (B.1) os autovalores destes operadores dependem apenas da parte real do parâmetro a , tendo que todos operadores com a mesma parte real deste

parâmetro definem uma classe, assim tomando o operador (B.11) para representar estas classes, obtemos

$$\begin{aligned}\chi_{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) &= \sum_{m=-j}^j D_{mm}^{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) = \\ &= \sum_{m=-j}^j e^{im\alpha} = \frac{\sin(j + 1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)},\end{aligned}\quad (\text{B.13})$$

em que j é um inteiro ou semi-inteiro.

Definição 2 Denotamos o grupo de todas as matrizes ortogonais 3×3 , definidas no corpo dos reais por $O(3)$, e seu subgrupo de matrizes cujo o determinante é 1 por $SO(3)$.

Sendo $M \in O(3)$, da definição de matriz ortogonal, segue que $M^{-1} = M^t$ e, como o determinante da transposta é igual ao da própria matriz, segue que o conjunto das matrizes M , que representam as operações de simetria em $\mathbb{R}^3$ são tais que

$$(\det M)^2 \Rightarrow \det M = \pm 1 \quad (\text{B.14})$$

É visível que o grupo $O(3)$ pode ser dividido no conjunto de operações cujo o determinante é 1 ($SO(3)$), este é o subgrupo das rotações próprias, e o subgrupo cujo o determinante é -1, este o conjunto das rotações impróprias e denotado por (E, J) . Portanto

$$O(3) = SO(3) \otimes (E, J) \quad (\text{B.15})$$

As representações irredutíveis de $SO(3)$, de maneira análoga a $SU(2)$, são determinadas pelos operadores pertencentes a este, que atuam em funções cujo o domínio é $\mathbb{R}^3$. Estas em questão, são os harmônicos esféricos, que formam um conjunto completo de autovetores e são denotadas por $Y_l^m(\theta, \phi)$, onde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, e $-l \leq m \leq l$. Como uma rotação de um dado ângulo determina uma classe, uma vez que, sempre há uma mudança de base que altera o eixo de rotação. Defini-se estas ocorrendo no eixo azimutal, obtendo assim que

$$R(\alpha)Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi - \alpha) = e^{-im\alpha}Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{B.16})$$

$$\Rightarrow R(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-ll\alpha} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-l(l-1)\alpha} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{l(l-1)\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{ll\alpha} \end{pmatrix} \quad (\text{B.17})$$

Assim, seu carácter é dado por

$$\begin{aligned}\chi^{(l)}(\alpha) &= \sum_{m=-l}^l e^{im\alpha} = e^{-i/\alpha}(1 + e^{i\alpha} + e^{2i\alpha} + e^{2il\alpha}) = \\ &= \frac{e^{i(l+1/2)\alpha} - e^{-i(l+1/2)\alpha}}{e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2}} = \frac{\sin(l + 1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)}\end{aligned}\quad (\text{B.18})$$

com $l \in \mathbb{Z}$.

Comparando (B.13) e (B.18), notamos as equações são equivalentes, alterando apenas a possibilidade de valores de j . Considerando uma rotação $\alpha + 2\pi$, obtemos

$$\chi_j(\alpha + 2\pi) = \frac{\sin[(j + 1/2)(\alpha + 2\pi)]}{\sin[(\alpha + 2\pi)/2]} = \chi_j(\alpha)(-1)^{2j} \quad (\text{B.19})$$

Logo, quando se tem j um semi-inteiro, haverá um operador a mais para cada um do grupo $SO(3)$, pois sua periodicidade é de 4π , exceto para C_2 , pois para este, ambos os caracteres adicionados de 2π e 4π , o resultado é 0. Pode-se representar esta associação por uma função sobrejetora $R^{-1} : \pm E_{SO(3)} \rightarrow E_{SU(2)}$.

Definição 3 *Define-se como homomorfismo a função contínua $f : A \rightarrow B$, que atua entre duas estruturas algébricas A e B , de maneira a preservar as operações que as define. O homomorfismo de grupos $(G, *)$ e $(H, \diamond)$, é o operador f tal que a operação binária é conservada*

$$\forall x, y \in (G, *) f(x * y) = f(x) \diamond f(y). \quad (\text{B.20})$$

É notório que R^{-1} estabelece um homomorfismo entre $SU(2)$ e $SO(3)$, e se considerarmos assim como em $SU(2)$, rotações de $(\alpha + 2\pi)$ distintas de (α) em $SO(3)$, apesarem de serem iguais, obteremos um isomorfismo entre estes dois grupos. Daí, os operadores de rotações estão bem definidos para $SO(3) \otimes SU(2)$. Tal grupo é denominado grupo duplo.

APÊNDICE C – Representações no espaço de spin

Neste tópicó serão deduzidas as representações dos operadores de simetria no espaço de spin. O operador rotação infinitesimal em $\mathbb{R}^3$ sobre um vetor $\mathbf{r}$, em relação a um eixo $\mathbf{u}$ é

$$R_{\mathbf{u}}(d\alpha)\mathbf{r} = \mathbf{r} + (d\alpha)\mathbf{u} \times \mathbf{r}. \quad (\text{C.1})$$

Como a rotação em uma função $\psi(x, y, z) = \psi(\mathbf{r})$ é equivalente a rotação inversa no domínio da função, segue que

$$\begin{aligned} R_z(d\alpha)\psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r} - (d\alpha)\hat{z} \times \mathbf{r}) = \psi(x + y(d\alpha), y - x(d\alpha), z) = \\ &= \psi(x, y, z) + d\alpha\left[y\frac{d\psi}{dx} - x\frac{d\psi}{dy}\right], \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

com $L_z = xp_y - yp_x$, temos

$$R_z(d\alpha)\psi(x, y, z) = \left[1 - \frac{i}{\hbar}(d\alpha)L_z\right]\psi(x, y, z). \quad (\text{C.3})$$

Pode-se generalizar este resultado para outros eixos de rotação, obtendo

$$R_{\mathbf{u}}(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar}(d\alpha)L_{\mathbf{u}}. \quad (\text{C.4})$$

Em um caso geral $R_{\mathbf{u}}(\alpha + d\alpha) = R_{\mathbf{u}}(\alpha)R_{\mathbf{u}}(d\alpha)$, segue que

$$R_{\mathbf{u}}(\alpha + d\alpha) = R_{\mathbf{u}}(\alpha)\left[1 - \frac{i}{\hbar}(d\alpha)L_{\mathbf{u}}\right] \quad (\text{C.5})$$

$$\Rightarrow \frac{R_{\mathbf{u}}(\alpha + d\alpha) - R_{\mathbf{u}}(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{i}{\hbar}L_{\mathbf{u}}R_{\mathbf{u}}(\alpha), \quad (\text{C.6})$$

cujó resultado implica em

$$R_{\mathbf{u}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_{\mathbf{u}}}. \quad (\text{C.7})$$

Como o operador $L_{\mathbf{u}}$ é no espaço de spin $S_{\mathbf{u}}$, pois este satisfaz as relações de comutação que os definem, os operadores de rotação no espaço de spin são representados por

$$R_{\mathbf{u}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{2}\alpha\sigma_{\mathbf{u}}}. \quad (\text{C.8})$$

Tendo o momento angular invariante sobre a operação de inversão, segue que, como uma reflexão em um eixo $\mathbf{n}$ é equivalente a inversão seguida de uma rotação em π no mesmo eixo, a representação do operador reflexão no espaço de spin, é dado por

$$M_{\mathbf{n}} = e^{-\frac{i}{2}\pi\sigma_{\mathbf{n}}}. \quad (\text{C.9})$$

APÊNDICE D – Códigos

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Pauli matrices: lattice(l) - valley(t) - spin(s)
5 l0 = t0 = s0 = np.array([[1, 0],[0, 1]])
6 lx = tx = sx = np.array([[0, 1],[1, 0]])
7 ly = ty = sy = np.array([[0, -1j],[1j, 0]])
8 lz = tz = sz = np.array([[1, 0],[0, -1]])
9
10 # basis: spin x valley x lattice x k
11 kron4 = lambda s,t,l,k=1: np.kron(s, np.kron(t, np.kron(l, k)))
12
13 # global parameters
14 a0 = 0.142 # nm, menor dist. entre dois carbonos
15 hbar = 0.6582119514 # meV.ps, Constante de planck
16 vf = 1e3 # nm/ps Velocidade de fermi
17 hvf = hbar*vf # meV.nm
18 Dk = (2*np.pi*np.sqrt(3.0))/(9*a0) # Dist. pts K-X-K' no eixo zigzag
19 ZBa = 2*np.pi/(3*a0) # 1/nm, largura ZB do armchair X-G-X
20
21 t = 2*hvf/(np.sqrt(3)*a0)
22 Δ = 0.1*t
23 λr = (3/2)*0.05*t
24 λa = +3*np.sqrt(3)*0.06*t
25 λb = -3*np.sqrt(3)*0.06*t # +/-
26
27 # define H as 8x8 matrices a function of kx,ky
28 Hk = lambda kx, ky: hvf*(kron4(s0, t0, lx, kx) + kron4(s0, tz, ly, ky))
29 Hz = -hvf*kron4(s0, t0, ly, Dk)
30 Hd = Δ*kron4(s0, t0, lz)
31 Hr = -λr*(kron4(sy, t0, lx) + kron4(sx, tz, ly))
32 Hi = 0.5*(λa*kron4(sz, tz, lz+10) + λb*kron4(sz, tz, lz-10))
33
34 # Wilson's mass
35 cot = lambda θ: 1.0/np.tan(θ)
36 csc = lambda θ: 1.0/np.sin(θ)
37 Uz = lambda η: η*kron4(s0, t0, ly) + (1-η)*kron4(s0, tx, ly)
38 Uc = lambda θ: cot(θ)*kron4(s0, t0, ly) + csc(θ)*kron4(s0, tx, ly)
39
40 # Wilson's mass check
41 def wilson(dx, toprint=True, dE=5e3):
42     minf = 0.5*dE*dx**2
43     msup = hvf**2/dE

```

```

44     mw = (msup+minf)/2
45     if minf > msup:
46         print("*** Error Wilson:")
47     if toprint:
48         print("    minf =", minf, "meV.nm2")
49         print("    msup =", msup, "meV.nm2")
50         print("    mw =", mw, "meV.nm2")
51     return mw
52
53 ny = 30
54
55 dθ = 20*(np.pi/180)
56 Na = 12
57 Ly = (Na+1)*np.sqrt(3)*a0/2
58 dy = Ly/(ny-1)
59
60 print("Ly:", np.round(Ly,2), "dy:", np.round(dy,2))
61
62 my = wilson(dy, dE=3e3)
63
64 iy = np.eye(ny)
65 ky = -1j*(np.eye(ny, k=1) - np.eye(ny, k=-1))/(2*dy)
66 ky2 = -(np.eye(ny, k=1) - 2*np.eye(ny, k=0) + np.eye(ny, k=-1))/dy**2
67
68 Hn = lambda kx, ma, θ: np.kron(Hd + Hr + Hi + Hz, iy) + Hk(kx*iy, ky) +
    0.5*ma*np.kron(Uc(θ), ky2)
69
70 size = ny*8
71 print('size:', size)
72
73 op_sz = np.kron(kron4(sz, t0, 10), iy)
74 def get_bands(kx):
75     evs, psi = np.linalg.eigh(Hn(kx, my, dθ+(2*np.pi/3)*(Na+1)))
76     sz = np.array([np.vdot(psi[:,n], np.dot(op_sz, psi[:,n])) for n in
    range(len(evs))])
77     print(sz)
78     return np.array([evs, sz])
79
80 only_bands = lambda kx: np.linalg.eigvalsh(Hn(kx, my, dθ+(2*np.pi/3)*(Na
    +1)))
81
82 ks = np.linspace(-4, 4, 101)
83 #evs = np.array([only_bands(kx) for kx in ks])/1000
84 bds = np.array([get_bands(ky) for ky in ks])
85 evs = np.real(bds[:,0,:])/1000
86 szs = np.real(bds[:,1,:])
87

```

```

88 #plt.plot(ks, evs)
89 for n in range(int(size/2-50), int(size/2+50)):
90     plt.scatter(ks, evs[:,n], c=szs[:,n], cmap='bwr', vmin=-1, vmax=+1,
91               s=5)
92 plt.ylim(-2,2)
93 plt.show()
94 plt.plot(ks, evs)
95 plt.ylim(-2,2)
96 plt.show()

```

Listagem D.1 – Código para a plotagem da estrutura de bandas de um confinamento Armchair do sistema analisado.

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Pauli matrices: lattice(l) - valley(t) - spin(s)
5 l0 = t0 = s0 = np.array([[1, 0],[0, 1]])
6 lx = tx = sx = np.array([[0, 1],[1, 0]])
7 ly = ty = sy = np.array([[0, -1j],[1j, 0]])
8 lz = tz = sz = np.array([[1, 0],[0, -1]])
9
10 # basis: spin x valley x lattice x k
11 kron4 = lambda s,t,l,k=1: np.kron(s, np.kron(t, np.kron(l, k)))
12
13 # global parameters
14 a0 = 0.142 # nm, menor dist. entre dois carbonos
15 hbar = 0.6582119514 # meV.ps, Constante de planck
16 vf = 1e3 # nm/ps Velocidade de fermi
17 hvf = hbar*vf # meV.nm
18 Dk = (2*np.pi*np.sqrt(3.0))/(9*a0) # Dist. pts K-X-K' no eixo zigzag
19 ZBa = 2*np.pi/(3*a0) # 1/nm, largura ZB do armchair X-G-X
20
21 t = 2*hvf/(np.sqrt(3)*a0)
22 δ = 0.1*t
23 λr = (3/2)*0.05*t
24 λa = +3*np.sqrt(3)*0.06*t
25 λb = -3*np.sqrt(3)*0.06*t # +/-
26
27 # define H as 8x8 matrices a function of kx,ky
28 Hk = lambda kx, ky: hvf*(kron4(s0, t0, lx, kx) + kron4(s0, tz, ly, ky))
29 Hz = -hvf*kron4(s0, t0, ly, Dk)
30 Hd = δ*kron4(s0, t0, lz)
31 Hr = -δr*(kron4(sy, t0, lx) + kron4(sx, tz, ly))
32 Hi = 0.5*(λa*kron4(sz, tz, lz+10) + λb*kron4(sz, tz, lz-10))
33
34 # Wilson's mass

```

```

35 cot = lambda  $\theta$ : 1.0/np.tan( $\theta$ )
36 csc = lambda  $\theta$ : 1.0/np.sin( $\theta$ )
37 Uz = lambda  $\eta$ :  $\eta$ *kron4(s0, t0, ly) + (1- $\eta$ )*kron4(s0, tx, ly)
38 Uc = lambda  $\theta$ : cot( $\theta$ )*kron4(s0, t0, ly) + csc( $\theta$ )*kron4(s0, tx, ly)
39
40 # Wilson's mass check
41 def wilson(dx, toprint=True, dE=5e3):
42     minf = 0.5*dE*dx**2
43     msup = hvf**2/dE
44     mw = (msup+minf)/2
45     if minf > msup:
46         print("*** Error Wilson:")
47     if toprint:
48         print("    minf =", minf, "meV.nm2")
49         print("    msup =", msup, "meV.nm2")
50         print("    mw =", mw, "meV.nm2")
51     return mw
52
53 nx = 20
54
55 Nz = 12 # dimers
56 Lx = (3*Nz/2 +1)*a0
57 dx = Lx/(nx-1)
58
59 print("Lx:", np.round(Lx,2), "dx:", np.round(dx,2))
60
61 mx = wilson(dx, dE=2e3)
62
63 ix = np.eye(nx)
64 kx = -1j*(np.eye(nx, k=1) - np.eye(nx, k=-1))/(2*dx)
65 kx2 = -(np.eye(nx, k=1) -2*np.eye(nx, k=0) + np.eye(nx,k=-1))/dx**2
66 Hn = lambda ky, mz,  $\eta$ : np.kron(Hd + Hr + Hi + Hz, ix) + Hk(kx, ky*ix) +
    0.5*mz*np.kron(Uz( $\eta$ ), kx2)
67
68 size = nx*8
69
70 x = np.linspace(-Lx/2, Lx/2, nx)
71 #LMR = 2*np.diag( np.heaviside(y-Ly/4, 0) + np.heaviside(-y-Ly/4, 0) -
    0.5 )
72 LMR = np.diag( np.heaviside(x-Lx/4, 0) - np.heaviside(-x-Lx/4, 0) )
73 print(LMR)
74 plt.plot(2*x/Lx, np.diag(LMR))
75 plt.show()
76
77 op_sz = np.kron(kron4(sz, t0, 10), ix)
78 op_lr = np.kron(kron4(s0, t0, 10), LMR)
79

```

```

80 def get_bands(ky):
81     evs, psi = np.linalg.eigh(Hn(ky, mx, 0))
82     sz = np.array([np.vdot(psi[:,n], np.dot(op_sz, psi[:,n])) for n in
83                     range(len(evs))])
84     lr = np.array([np.vdot(psi[:,n], np.dot(op_lr, psi[:,n])) for n in
85                     range(len(evs))])
86     return np.array([evs, sz, lr])
87
88 ks = np.linspace(-12, 12, 101)
89 bds = np.array([get_bands(ky) for ky in tqdm(ks)])
90 evs = np.real(bds[:,0,:]/1000)
91 szs = np.real(bds[:,1,:])
92 lrs = np.real(bds[:,2,:])
93
94 plt.plot(ks, evs, c='black', lw=0.5)
95
96 for n in range(int(size/2-50), int(size/2+50)):
97     ids = np.nonzero(lrs[:,n] < -0.5)[0][::2]
98     plt.scatter(ks[ids], evs[ids,n], c=szs[ids,n], cmap='bwr', vmin=-1,
99                 vmax=+1, s=20*np.abs(lrs[ids,n]),
100                 marker='v')
101
102     ids = np.nonzero(lrs[:,n] > +0.5)[0][::2]
103     plt.scatter(ks[ids], evs[ids,n], c=szs[ids,n], cmap='bwr', vmin=-1,
104                 vmax=+1, s=20*np.abs(lrs[ids,n]),
105                 marker='^')
106
107     ids = np.nonzero((-0.5 < lrs[:,n]) & (lrs[:,n] < +0.5))[0]
108     plt.scatter(ks[ids], evs[ids,n], c=szs[ids,n], cmap='bwr', vmin
109                 =-1, vmax=+1, s=10*np.abs(lrs[ids,n]),
110                 marker='o')
111
112 plt.ylim(-3,3)
113 plt.colorbar()
114 plt.show()

```

Listagem D.2 – Código para a plotagem da estrutura de bandas de um confinamento Zigzag do sistema analisado.

```

1
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import kwant
5 import kwant.continuum as kc
6 from tqdm.auto import tqdm
7 from scipy.signal import find_peaks
8

```

```

9 # ignore warnings from kwant ragged arrays
10 np.warnings.filterwarnings('ignore', category=np.
    VisibleDeprecationWarning)
11
12 # Pauli matrices: lattice(l) - valley(t) - spin(s)
13 l0 = t0 = s0 = np.array([[1, 0],[0, 1]])
14 lx = tx = sx = np.array([[0, 1],[1, 0]])
15 ly = ty = sy = np.array([[0, -1j],[1j, 0]])
16 lz = tz = sz = np.array([[1, 0],[0, -1]])
17
18 # basis: spin x valley x lattice x k
19 kron4 = lambda s,t,l,k=1: np.kron(s, np.kron(t, np.kron(l, k)))
20 U000 = kron4(s0, t0, l0)
21 U00x = kron4(s0, t0, lx)
22 U00y = kron4(s0, t0, ly)
23 U00z = kron4(s0, t0, lz)
24 U0xy = kron4(s0, tx, ly)
25 U0zy = kron4(s0, tz, ly)
26 Uy0x = kron4(sy, t0, lx)
27 Uxzy = kron4(sx, tz, ly)
28 Uzzp = kron4(sz, tz, lz+l0)
29 Uzzm = kron4(sz, tz, lz-l0)
30 # operators
31 Uz00 = kron4(sz, t0, l0) # spin
32 U0z0 = kron4(s0, tz, l0) # valley
33 U00z = kron4(s0, t0, lz) # sublattice
34
35 def makesys(a, Lx, Ly, hvf, Dk,  $\delta$ ,  $\lambda_r$ ,  $\lambda_a$ ,  $\lambda_b$ , mz,  $\eta$ , ma,  $\theta$ , t):
36     proxgraphene = '''
37         (+hvf*(U00x*k_x + U0zy*k_y)
38         -hvf*U00y*Dk
39         + $\theta$ *U00z
40         - $\lambda_r$ *(Uy0x + Uxzy)
41         +0.5*( $\lambda_a$ *Uzzp +  $\lambda_b$ *Uzzm)
42         +0.5*mz*( $\eta$ *U00y + (1- $\eta$ )*U0xy)*k_x^2
43         +0.5*ma*(cot*U00y + csc*U0xy)*k_y^2)/1000
44     '''
45     metal = 't*(a**2)*(k_x^2 + k_y^2 - 2/a**2)*U000'
46     # discretize template
47     params = {
48         'U00x': U00x, 'U0zy': U0zy, 'U00y': U00y, 'U00z': U00z,
49         'Uy0x': Uy0x, 'Uxzy': Uxzy, 'Uzzp': Uzzp, 'Uzzm': Uzzm,
50         'U00y': U00y, 'U0xy': U0xy, 'U0xy': U0xy, 'U000': U000,
51         'cot': 1.0/np.tan( $\theta$ ), 'csc': 1.0/np.sin( $\theta$ ),
52         'hvf': hvf, 'Dk': Dk, ' $\delta$ ':  $\delta$ , ' $\lambda_r$ ':  $\lambda_r$ , ' $\lambda_a$ ':  $\lambda_a$ , ' $\lambda_b$ ':  $\lambda_b$ ,
53         'mz': mz, ' $\eta$ ':  $\eta$ , 'ma': ma, 't': t, 'a': a
54     }

```

```

55     proxgraphene = kc.discretize(proxgraphene, grid=a, locals=params)
56     metal = kc.discretize(metal, grid=a, locals=params)
57     # shape function
58     def shape_sys(site):
59         x, y = site.pos
60         if np.abs(x) < Lx/2 and np.abs(y) < Ly/2:
61             return True
62         else:
63             return False
64
65     def shape_lead(site):
66         x, y = site.pos
67         if np.abs(x) < Lx/2/4 and np.abs(y) < Ly/2/4:
68             return True
69         else:
70             return False
71
72     # build system
73     syst = kwant.Builder()
74     syst.fill(proxgraphene, shape_sys, (0,0))
75     lead = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry((-a,0)))
76     lead.fill(metal, shape_lead, (0,0))
77     syst.attach_lead(lead)
78     syst.attach_lead(lead.reversed())
79
80     # LARGE LEADS FOR BANDS
81     # lead 1
82     ribbonA = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry((a,0)))
83     ribbonA.fill(proxgraphene, shape_sys, (0,0))
84     # lead 2
85     ribbonZ = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry((0,a)))
86     ribbonZ.fill(proxgraphene, shape_sys, (0,0))
87
88     syst = syst.finalized()
89     ribbonA = ribbonA.finalized()
90     ribbonZ = ribbonZ.finalized()
91
92     return syst, ribbonA, ribbonZ
93 # Graphene parameters
94 a0 = 0.142 # nm, menor dist. entre dois carbonos
95 hbar = 0.6582119514 # meV.ps, Constante de planck
96 vf = 1e3 # nm/ps Velocidade de fermi
97 hvf = hbar*vf # meV.nm
98 Dk = (2*np.pi*np.sqrt(3.0))/(9*a0) # Dist. pts K-X-K' no eixo zigzag
99 # From Fabian:
100 t = 2*hvf/(np.sqrt(3)*a0)
101  $\delta$  = 0.1*t

```

```

102  $\lambda_r$  = (3/2)*0.05*t
103  $\lambda_a$  = +3*np.sqrt(3)*0.06*t
104  $\lambda_b$  = +3*np.sqrt(3)*0.06*t # always +, changing sign later
105
106 # Wilson's mass check
107 def wilson(dx, toprint=False, dE=5e3):
108     minf = 0.5*dE*dx**2
109     msup = hvf**2/dE
110     mw = (msup+minf)/2
111     if minf > msup:
112         print("*** Error Wilson")
113     if toprint:
114         print("    minf =", minf, "meV.nm2")
115         print("    msup =", msup, "meV.nm2")
116         print("    mw =", mw, "meV.nm2")
117     return mw
118
119 Nz = 40 # dimers
120 Lx = (3*Nz/2 +1)*a0
121
122 Na = 61
123 Ly = (Na+1)*np.sqrt(3)*a0/2
124 d $\theta$  = 20*(np.pi/180)
125
126 npts = 100
127 dx = Lx/(npts-1)
128 dy = Ly/(npts-1)
129 a = np.min([dx,dy])
130
131 print("Lx (nm):", np.round(Lx,2), "dx:", np.round(dx,2))
132 print("Ly (nm):", np.round(Ly,2), "dy:", np.round(dy,2))
133 mz = wilson(dx, dE=4e3)
134 ma = wilson(dy, dE=4e3)
135
136  $\eta$  = 0
137  $\theta$  = d $\theta$  + (2*np.pi/3)*(Na+1)
138
139 # for  $\lambda_b > 0$  (P) (topological)
140 sysP, armchairP, zigzagP = makesys(a, Lx, Ly, hvf, Dk,  $\delta$ ,  $\lambda_r$ ,  $\lambda_a$ , + $\lambda_b$ , mz
    ,  $\eta$ , ma,  $\theta$ , 1)
141 # for  $\lambda_b < 0$  (N) (pseudo-helical)
142 sysN, armchairN, zigzagN = makesys(a, Lx, Ly, hvf, Dk,  $\delta$ ,  $\lambda_r$ ,  $\lambda_a$ , - $\lambda_b$ , mz
    ,  $\eta$ , ma,  $\theta$ , 1)
143
144 #kwant.plot(sysP);
145
146 # operators for spin density

```

```

147 OPspinP = kwant.operator.Density(sysP, Uz00)
148 OPspinN = kwant.operator.Density(sysN, Uz00)
149 # operators for current density
150 OPcurrP = kwant.operator.Current(sysP)
151 OPcurrN = kwant.operator.Current(sysN)
152
153 e0 = 0.21212121212121213
154 wfP = kwant.wave_function(sysP, energy=e0)
155 wfN = kwant.wave_function(sysN, energy=e0)
156 psiP = wfP(0)
157 psiN = wfN(0)
158
159 spinP = 0
160 currP = 0
161 for p in tqdm(psiP):
162     spinP += OPspinP(p)
163     currP += OPcurrP(p)
164
165 spinN = 0
166 currN = 0
167 for p in tqdm(psiN):
168     spinN += OPspinN(p)
169     currN += OPcurrN(p)
170
171 fig = plt.figure(figsize=(10,4))
172
173 plt.subplot(121)
174 ax = fig.gca()
175 kwant.plotter.current(sysP, currP, ax=ax)
176 #vmax = np.max(np.abs(spinP))
177 kwant.plotter.density(sysP, spinP, ax=ax, cmap='bwr')#, vmin=-vmax, vmax
    =+vmax)
178 imgs = ax.get_images()
179 ax.images.remove(imgs[0])
180 fig.colorbar(imgs[1])
181 ax.set_xlabel(r' $x$ ')
182 ax.set_ylabel(r' $y$ ')
183
184 plt.subplot(122)
185 ax = fig.gca()
186 kwant.plotter.current(sysN, currN, ax=ax)
187 #vmax = np.max(np.abs(spinN))
188 kwant.plotter.density(sysN, spinN, ax=ax, cmap='bwr')#, vmin=-vmax, vmax
    =+vmax)
189 imgs = ax.get_images()
190 ax.images.remove(imgs[0])
191 fig.colorbar(imgs[1])

```

```
192 ax.set_xlabel(r' $x$ ')
193 ax.set_ylabel(r' $y$ ')
194
195 plt.tight_layout()
196 plt.show()
```

Listagem D.3 – Código para a plotagem do mapa de cores das densidades de estados spin polarizados nas bordas de um confinamento retangular do sistema analisado.