

Olavo Viola

Oscilações de Shubnikov–de Haas em isolantes topológicos

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

Olavo Viola

Oscilações de Shubnikov–de Haas em isolantes topológicos

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Física da Universidade Federal
de Uberlândia como requisito parcial para
obtenção do título de Licenciado em Física.

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Instituto de Física – INFIS

Licenciatura em Física

Orientador: Prof. Dr. Gerson J. Ferreira

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

*Dedico este trabalho aos meus pais, Ricardo e Marcia.
Esta conquista também lhes pertence.*

Agradecimentos

Quero expressar gratidão aos meus pais, Marcia Regina da Silva Viola e Ricardo Viola. O apoio de vocês foi fundamental em cada etapa dos meus estudos. Sem a orientação e o carinho que me dedicaram, certamente não estaria onde estou hoje. Sou grato por toda a jornada que trilhamos juntos até agora e mal posso esperar para vivenciarmos muitas outras experiências e conquistas no futuro. Dedico este trabalho como uma singela expressão do amor que tenho por vocês, meus amados pais.

Agradeço muito a todos os membros da minha família, incluindo os meus queridos avós, tios e primos, em especial à minha madrinha e irmã de coração, Adriana Camassuti Guariz, cuja presença e apoio fora inestimáveis em minha jornada. Recordo o momento em que me acompanhou até o ponto de ônibus na ocasião da minha primeira viagem para Uberlândia-MG, para prosseguir com os estudos. Confio que tenhas encontrado o merecido descanso e paz eterna.

Também agradeço a todos os meus professores que me trilharam até aqui. Em especial, agradeço à minha primeira professora de Física, Prof.^a Maria José Montenegro. Ao primeiro que me recebeu na Universidade Federal de Uberlândia (UFU) antes mesmo do meu ingresso oficial como discente, Prof. Dr. Ricardo Kagimura. Obrigado por todo o apoio e atenção que me ofereceu durante o curso de Física. Sou imensamente grato pelo seu carinho e preocupação com os estudantes e com a educação.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Gerson J. Ferreira por esses anos de pesquisa e orientação. Obrigado por sua dedicação e paciência, sempre disposto a me ajudar e a compartilhar seu extenso conhecimento. Também agradeço à minha orientadora do Programa de Educação Tutorial (PET) Física Prof.^a Dr.^a Mariana M. Odashima por todos os anos de pesquisa e dedicação aos projetos que realizamos juntos em nome do PET. A vocês, Gerson e Mariana, minha gratidão por terem me acolhido como família.

Aos meus estimados amigos de Monte Alto-SP e aos que conheci em Uberlândia-MG, expresso minha profunda gratidão por sua constante presença em minha vida. Juntos, compartilhamos muitos desafios, risos, choros, brindes e desfrutamos de conversas enriquecedoras. Não posso deixar de agradecer também à calorosa família do PET Física UFU por tantos anos de parceria e amizade. Nossa jornada juntos é verdadeiramente valiosa. Agradeço à UFU, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo financiamento da minha Iniciação Científica e do meu trabalho de extensão no PET Física.

Por fim, agradeço a todas as causas e condições que me trouxeram até aqui.

*Quero falar de uma coisa
Adivinha onde ela anda
Deve estar dentro do peito
Ou caminha pelo ar*

*Pode estar aqui do lado
Bem mais perto que pensamos
A folha da juventude
É o nome certo desse amor*

*Já podaram seus momentos
Desviaram seu destino
Seu sorriso de menino
Quantas vezes se escondeu*

*Mas renova-se a esperança
Nova aurora a cada dia
E há que se cuidar do broto
Pra que a vida nos dê flor
Flor e fruto*

*Coração de estudante
Há que se cuidar da vida
Há que se cuidar do mundo
Tomar conta da amizade*

*Alegria e muito sonho
Espalhados no caminho
Verdes, planta e sentimento
Folhas, coração, juventude e fé.*

“CORAÇÃO DE ESTUDANTE”

Milton Nascimento, 1983.

Resumo

Isolantes topológicos (TIs) foram introduzidos por volta da década de 80 no estudo de estados topológicos em sistemas quânticos, ou seja, estados protegidos contra deformações contínuas e impurezas. Somente no começo do sec. XXI é que essa classe de materiais foi implementada, de fato, no estudo de materiais avançados no ramo da física da matéria condensada e da spintrônica: quando os físicos Bernevig, Hughes e Zhang (BHZ) estudaram o efeito Hall quântico de spin em poços quânticos de HgTe. Essa modelagem de materiais topológicos, que ficou conhecida como “modelo BHZ”, descreve estados de borda topológicos com condutividade protegida de impurezas, sendo amplamente promissora no ramo da indústria de materiais. Interpretações teóricas desse efeito são fornecidas por oscilações quânticas, como por exemplo Shubnikov-de Haas (SdH), que corresponde a oscilações na magneto-resistência em sistemas bidimensionais submetidos a um campo magnético externo. A descrição analítica desse fenômeno está baseada na equação de Lifshitz-Kosevich (LK); no entanto, soluções analíticas dessa para o Hamiltoniano BHZ não produzem resultados acurados na presença de acoplamento spin-órbita (SOI) e termos do efeito Zeeman sem que aproximações significativas sejam realizadas. Logo, este trabalho de pesquisa tem como fito estudar os efeitos de SOI e Zeeman para as oscilações de SdH em sistemas bidimensionais, em especial os TIs. Para isso, consideramos o modelo de Drude para transporte eletrônico combinado com a aproximação de Born para a taxa de espalhamento para reescrever a resistência longitudinal do efeito Hall quântico em termos da densidade de estados (DOS) no nível de Fermi. Como resultado, utilizando-se do pacote Kwant do Python para calcular numericamente a DOS, obtêm-se o espectro das frequências das oscilações de SdH em TIs e em gases bidimensionais de elétrons, como o GaAs e o InSb. Esse fenômeno quântico é uma ferramenta fundamental para caracterizar quantidades relativas ao transporte eletrônico em materiais como a densidade de carga, resistividade Hall, massa efetiva das bandas, fase de Berry, dentre outras informações que ajudam no desenvolvimento de novos materiais para a indústria da spintrônica, colaborando para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos mais eficazes e mais poderosos no ramo da computação quântica.

Palavras-chave: Isolantes Topológicos, Oscilações Quânticas, Shubnikov-de Haas.

Abstract

Topological insulators (TIs) were introduced around the 1980s in the study of topological states in quantum systems, i.e., states protected by continuous deformations and impurities. It was only at the beginning of the 21st century that this class of materials was effectively implemented in the study of advanced materials in the field of condensed matter physics and spintronics when physicists Bernevig, Hughes, and Zhang (BHZ) studied the quantum spin Hall effect in HgTe quantum wells. This modeling of topological materials, which became known as the “BHZ model”, describes topological edge states with impurity-protected conductivity, making it highly promising in the materials industry. Theoretical interpretations of this effect are provided by quantum oscillations, such as the Shubnikov-de Haas (SdH) effect, which corresponds to oscillations in magneto-resistance in two-dimensional systems subjected to an external magnetic field. The analytical description of this phenomenon is based on the Lifshitz-Kosevich (LK) equation; however, analytical solutions of this for the BHZ Hamiltonian do not produce accurate results in the presence of spin-orbit coupling (SOI) and Zeeman effect terms without significant approximations. Therefore, this research aims to study the effects of SOI and Zeeman on SdH oscillations in two-dimensional systems, particularly TIs. For this purpose, we consider the Drude model for electronic transport combined with the Born approximation for the scattering rate to rewrite the longitudinal resistance of the quantum Hall effect in terms of the density of states (DOS) at the Fermi level. As a result, using the Kwant package in Python to numerically calculate the DOS, the spectrum of SdH oscillation frequencies in TIs and two-dimensional electron gases, such as GaAs and InSb, is obtained. This quantum phenomenon is a fundamental tool for characterizing quantities related to electronic transport in materials, such as charge density, Hall resistivity, effective band mass, Berry phase, among other information that aids in the development of new materials for the spintronics industry, contributing to the advancement of more efficient and powerful electronic devices in the field of quantum computing.

Keywords: Topological Insulators, Quantum Oscillations, Shubnikov-de Haas.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Oscilações quânticas	15
1.2	Isolantes topológicos	16
1.3	Objetivos e Justificativas	19
2	MÉTODOS	21
2.1	A equação de Schrödinger	21
2.2	O oscilador harmônico quântico	23
2.2.1	A relação entre os operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$ com os estados $ \psi_n\rangle$	26
2.3	Níveis de Landau	27
2.4	Shubnikov-de Haas	30
2.4.1	Efeitos Hall: o modelo de Drude	30
2.4.2	Modelo de Prange	35
2.4.3	A equação de Lifshits-Kosevich	37
2.4.4	Fase de Berry	38
2.4.5	Densidade de estados via modelo de Drude	39
2.5	Modelo BHZ: análise via simetrias e método dos invariantes	41
3	RESULTADOS	45
3.1	Poços de GaAs	45
3.2	Poços de InSb	49
3.3	Poços de HgTe/CdTe	50
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	55
	REFERÊNCIAS	57
	APÊNDICES	61
	APÊNDICE A – SISTEMAS BIDIMENSIONAIS DE ELÉTRONS COM DUAS SUB-BANDAS	63

1 Introdução

A spintrônica é uma área da Física que se dedica ao estudo do transporte de informações eletrônicas, com foco no comportamento do spin dos elétrons em uma variedade de materiais (PULIZZI, 2012; ZHANG et al., 2024). Essa área desempenha um papel fundamental no avanço da computação quântica, que se baseia em princípios da mecânica quântica e da física da matéria condensada. Um dos objetivos dessa linha de pesquisa é desenvolver novas tecnologias quânticas para computação, como a criação de dispositivos semicondutores inovadores, incluindo transistores e diodos. Um dos aspectos mais explorados na spintrônica é o comportamento dos elétrons em sistemas sujeitos a campos magnéticos externos, que resultam em oscilações quânticas, tema central deste estudo. Esse fenômeno tem sido estudado por mais de cem anos e ainda apresenta desafios, especialmente no que diz respeito aos isolantes topológicos (TIs), uma classe de materiais com propriedades de simetrias não triviais, que se comportam como isolantes em seu interior e como condutores em suas bordas (HE et al., 2021; ANIRBAN, 2023). Atualmente, esses materiais despertam grande interesse no campo da física de semicondutores, no entanto, ainda existem questões teóricas em aberto sobre suas propriedades eletrônicas, como a fase das oscilações quânticas, que serão exploradas e discutidas neste estudo.

1.1 Oscilações quânticas

Materiais bidimensionais de gás de elétrons (2DEGs) são um ponto de partida usual para o estudo das oscilações quânticas (STEIN; KLITZING; WEIMANN, 1983; STORMER et al., 1983; LI et al., 2015). Devido a aplicação de um campo magnético, os níveis de energia dos elétrons são quantizados em bandas, denominadas níveis de Landau, cuja distribuição é uma função da intensidade do campo (LANDAU, 1930). Ao variar a intensidade desse, flutuações na densidade de estados eletrônicos, no nível de Fermi, começam a ocorrer. O interessante na análise dessa interação é que cada material possui uma assinatura no comportamento dessas oscilações, de onde propriedades importantes podem ser extraídas, como a resistência Hall, suscetibilidade magnética, massa efetiva, densidade de estados (DOS), fator giromagnético, fase de Berry, entre outras (ZHAO; WANG, 2022). Estas oscilações se manifestam em duas medidas experimentais: oscilações de Shubnikov-de Haas (SdH) e oscilações de Haas-Van Alphen (dHvA) (SCHUBNIKOW; HAAS, 1930; HAAS; ALPHEN, 1930). Neste trabalho, focaremos apenas no estudo das oscilações quânticas no regime do efeito de SdH, em que variações na magneto-resistência ou magneto-condutividade de materiais semicondutores são observadas para baixos valores de campo magnético, enquanto que dHvA descreve as oscilações na suscetibilidade magnética.

As oscilações de SdH, descobertas pelos físicos Lev Shubnikov, Olga Shubnikov e Wander Johannes de Haas em 1930, são um fenômeno quântico que ocorre em sistemas de elétrons confinados em materiais semicondutores ou condutores de dimensões pequenas, quando submetidos a um campo magnético externo. Esse fenômeno é uma consequência direta da quantização do momento angular orbital dos elétrons, perpendicular ao plano do material, estando intimamente ligado ao efeito Hall quântico inteiro (IQHE). Esse último é observado quando a condutividade elétrica transversal do sistema se torna quantizada em múltiplos inteiros de um fator fundamental relativo ao fluxo magnético sobre o sistema. Conforme o campo magnético aumenta, mais estados de Landau são ocupados pelos elétrons, resultando em oscilações periódicas na condutividade elétrica do material. As oscilações de SdH podem ser consideradas como um regime intermediário entre o regime clássico do efeito Hall (HE) (ASHCROFT; MERMIN, 1976) e o regime do IQHE (KLITZING, 1986). Além disso, existem várias aplicações desse fenômeno, como a obtenção de informações referentes a densidade de elétrons de um sistema, mobilidade eletrônica, informações sobre a fase de Berry¹, massa efetiva de elétrons, propriedades magnéticas como o momento e a interação entre os spins, denominada interação do acoplamento spin-órbita (SO) (BYCHKOV; RASHBA, 1984; RASHBA, 2016), a qual discutiremos mais adiante.

1.2 Isolantes topológicos

Um material topológico se caracteriza, de forma geral, por um comportamento dual: enquanto no seu interior age como um isolante, na superfície (ou fronteira) exibe propriedades metálicas. No *bulk* (interior), a estrutura de bandas eletrônicas se assemelha à de um isolante convencional, apresentando bandas de condução e de valência separadas. No entanto, próximo à superfície, surgem estados eletrônicos que se situam dentro da lacuna de energia do material, seja tridimensional ou bidimensional, permitindo a condução de elétrons. Além disso, os spins nessas superfícies estão rigidamente acoplados a seus momentos, o que contribui para a estabilidade das propriedades eletrônicas. É importante destacar que um TI mantém a simetria de reversão temporal, garantindo que os processos físicos possam ocorrer de forma reversível. Ademais, quando os efeitos de acoplamento SO não são muito pronunciados, os estados superficiais resultantes podem se mostrar menos estáveis em relação à desordem ou impurezas, embora sua física seja comparável à observada em estados bidimensionais. Em suma, os TIs apresentam um alto acoplamento spin-órbita, pois geralmente são compostos por átomos pesados, onde os efeitos relativísticos do acoplamento fino são mais relevantes (SHEN, 2012).

¹ Fase de Berry se refere a uma quantidade geométrica associada à evolução adiabática de estados quânticos em sistemas com simetria translacional e periodicidade espacial que descreve a mudança de fase que ocorre quando um parâmetro externo é variado (BERNEVIG, 2013).

A topologia aplicada nesse contexto pode ser entendida em analogia à geometria diferencial. No espaço euclidiano, a curvatura de Gauss é uma propriedade intrínseca que descreve como uma superfície no $\mathbb{R}^3$ se transforma perante a deformações, sendo fundamental para classifica-las perante sua topologia, ou seja, de acordo com suas características geométricas. No contexto dos materiais topológicos, as funções de onda dos elétrons são descritas no espaço de Hilbert, $L^2(\mathbb{R}^n)$, o espaço de todas as funções de onda $\Psi(\mathbf{r})$ de um sistema quântico que são quadrado-integráveis, ou seja, que possuem norma finita. Matematicamente representando,

$$||\Psi||^2 := \int_{\mathbb{R}^n} \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} < \infty. \quad (1.1)$$

Mais a frente, veremos que essa definição é interpretada como a densidade de probabilidade de determinar a posição de uma partícula num sistema quântico. Feito essa definição, no espaço de Hilbert surge uma estrutura geométrica relacionada à curvatura de Berry, uma métrica que, assim como a de Gauss, caracteriza aspectos globais do sistema, mas, nesse caso, descreve como a função de onda de um sistema evolui quando submetida a variações adiabáticas dos parâmetros do Hamiltoniano. Essa curvatura é uma grandeza invariante, o que significa que sua integral, denominada fase de Berry, sobre um ciclo fechado no espaço de parâmetros, permanece a mesma, desde que não haja transições de fase: em TIs, essa fase de Berry adquirida reflete a estrutura não trivial da função de onda. Isso implica a existência de estados de borda protegidos por simetrias fundamentais, como a de reversão temporal, que são robustos contra perturbações e desordens. Nos próximos capítulos, definiremos essa fase formalmente aplicando uma mudança adiabática num vetor do espaço de parâmetros, no qual os estados evoluem no tempo. Assim, da mesma forma que a curvatura de Gauss classifica superfícies geométricas, a curvatura de Berry define as propriedades topológicas das fases quânticas, diferenciando os TIs de isolantes triviais.

O aspecto dos Hamiltonianos para TIs possuem a mesma estrutura matemática da equação de Dirac, ou seja, próximo ao nível de Fermi, o Hamiltoniano efetivo que descreve o sistema, pode ser derivado pela teoria dos invariantes ou pelo método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, como ilustra a Fig.1 para o caso de um TI bidimensional. Nesse caso, consideramos as contribuições lineares e quadráticas de $\mathbf{k}$, o que dá origem ao formato hiperbólico das bandas. Atualmente, o crescimento no estudo de TIs levantou novos olhares para a obtenção de informações via SdH. A compreensão dos TIs começaram com o modelo base de Haldane em 1988 na descrição de um sistema cuja existência de estados quânticos topológicos foi observado (HALDANE, 1988). Mais tarde, em 2005, Kane e Mele (KANE; MELE, 2005) demonstraram que uma única camada de grafeno possui estrutura de banda topológica não trivial com acoplamento spin-órbita (SOC) induzido, o qual dá origem ao efeito Hall quântico de spin (SQHE) (KIM et al., 2016). Também citamos os trabalhos desenvolvidos por Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs (TKNN) (THOULESS et al., 1982) em 1982 na descrição topológica do IQHE pela quantização da condutividade Hall em termos de

números inteiros que correspondem aos números de Chern (HATSUGAI, 1993) da teoria de bandas em física do estado sólido, fenômeno esse consequente das propriedades topológicas dos estados eletrônicos na presença de campos magnéticos que serviu de base para o desenvolvimento do modelo de Haldane e Kane-Mele anos depois.

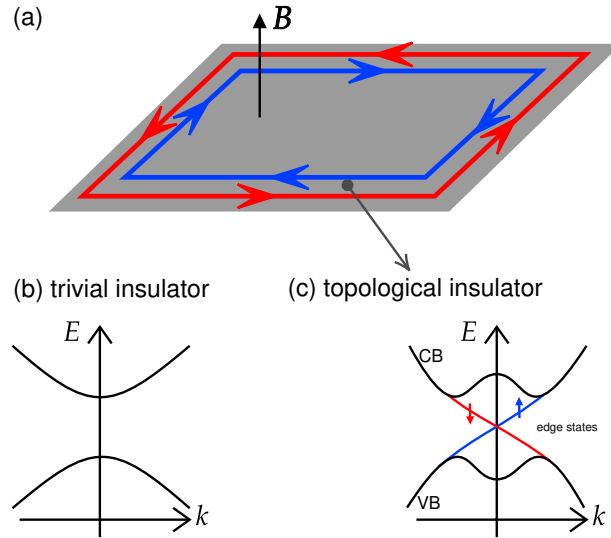


Figura 1 – (a) Esquema de um TI bidimensional na presença de um campo magnético B . As setas/caminhos azuis e vermelhos representam a configuração de spins *up* e *down* no material. Os gráficos representam as estruturas de bandas para (b) um isolante trivial e (c) para o interior do *bulk* de um TI com a esquematização das bandas de condução e valência (CB e VB) e das bandas resultantes dos estados de borda (edge states). Fonte: os autores.

Até então, os materiais topológicos (TIs) não eram amplamente aplicáveis em sistemas reais, exceto no caso do grafeno. Essa classe de materiais começou a ganhar destaque na indústria da spintrônica em 2006, quando Bernevig, Hughes e Zhang introduziram o modelo BHZ, que se propunha a estudar o efeito Hall quântico de spin em poços quânticos de HgTe (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006). Desde então, sistemas quânticos baseados nesse modelo têm sido alvo de intensa pesquisa, devido às suas propriedades topológicas únicas, que proporcionam uma robusta proteção aos estados de condução. Nos últimos anos, os materiais topológicos têm se destacado em diversas plataformas, impulsionados por suas perspectivas promissoras na spintrônica e suas propriedades distintivas, que estão sendo exploradas para desenvolver aplicações tecnológicas avançadas na indústria de materiais.

1.3 Objetivos e Justificativas

Apesar dos avanços significativos nessa área de estudo, a precisão no cálculo das oscilações quânticas, especialmente o efeito SdH em TIs, ainda é um desafio. As atuais abordagens baseadas nas equações de Lifshits-Kosevich (LK) e em Hamiltonianos do tipo Dirac (lineares em $\mathbf{k}$) não oferecem uma descrição analítica adequada, especialmente para modelos complexos, como os TIs, considerando-se os efeitos de acoplamento SO e fator giromagnético (LIFSHITS; KOSEVICH, 1958). As oscilações de SdH são essenciais para entender a estrutura eletrônica de materiais e podem fornecer informações valiosas sobre diversas propriedades, como descrito anteriormente. Diante desse contexto, o objetivo principal desta pesquisa é estudar em detalhes as características das oscilações de SdH nestes materiais via cálculo numérico em 2DEGs com acoplamento SO do tipo Rashba e Dresselhaus e efeito Zeeman (CANDIDO et al., 2023) e em TIs. Para alcançar esse objetivo, propomos, neste trabalho, utilizar o modelo de Drude, para transporte eletrônico, combinado com a aproximação de Born, para a taxa de espalhamento, para estudar o modelo fenomenológico em que a resistência longitudinal do efeito Hall quântico é proporcional à DOS no nível de Fermi (BARGE, 2012). Essa abordagem nos permitirá reescrever a resistividade longitudinal no IQHE em termos da DOS, o que nos permitirá realizar uma avaliação teórica utilizando ferramentas computacionais como o pacote Kwant do Python (GROTH et al., 2014). Em suma, neste trabalho buscamos investigar como as oscilações de SdH podem ser utilizadas como uma ferramenta fundamental para a caracterização de TIs, em especial no cálculo da fase de Berry. Pretendemos explorar como a frequência dessas oscilações está relacionada com parâmetros importantes do material, como a densidade de carga em suas bandas, a DOS e a massa efetiva. Essas investigações não apenas contribuirão para uma compreensão mais profunda sobre TIs, mas também poderão abrir novas possibilidades para aplicações tecnológicas baseadas em suas propriedades únicas.

2 Métodos

2.1 A equação de Schrödinger

Em mecânica clássica, para descrever a posição de uma partícula de massa m se movendo no espaço $\mathbb{R}^3$, utilizamos as leis de Newton para determinar a lei temporal da posição $\mathbf{r}(t)$, da velocidade $\mathbf{v}(t)$ e, conseqüentemente, do momento $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, entre outras variáveis de dinâmica. Em mecânica quântica, dada uma partícula de massa m se movendo ao longo do espaço, é impossível determinar, num mesmo tempo, sua posição e momento, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg. Para tanto, defini-se o primeiro postulado da mecânica quântica, que leva em conta o estado em que se encontra essa partícula descrito pela função de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ (FRENCH; TAYLOR, 1978).

Postulado 2.1. *O estado de qualquer sistema físico no tempo é dado pelo vetor de estado $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, em que $\mathcal{H}$ é o espaço de Hilbert, um espaço vetorial cuja métrica gerada pelo produto interno o torna um espaço completo em relação a norma, $\|\cdot\| = \langle \cdot, \cdot \rangle^{1/2}$.*

Todo sistema quântico é definido por $|\psi(t)\rangle$, que contém todas as informações necessárias para descrevê-lo. A função de onda, no estado de posição, é descrita por

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle. \quad (2.1)$$

O significado físico dessa função de onda reside no quadrado de sua norma que, de acordo com a interpretação probabilística de Born, refere-se a probabilidade de encontrar uma partícula num dado instante t , num elemento de volume d^3r . Defini-se, assim, que a função densidade de probabilidade é dada por

$$P(\mathbf{r}, t) = \|\psi(\mathbf{r}, t)\|^2. \quad (2.2)$$

A condição de normalização é de que essa probabilidade em todo o espaço seja igual a um, pois ψ descreve uma partícula como uma onda num dado espaço de existência dessa partícula, logo é impossível que a probabilidade de encontrá-la em todo o espaço seja maior que um:

$$\int_{\mathcal{H}} \|\psi(\mathbf{r}, t)\|^2 d^3r = 1. \quad (2.3)$$

Antes de introduzirmos a equação de Schrödinger, que descreve a função de onda para partículas sob influência de um dado potencial, precisamos introduzir os operadores quânticos. O próximo postulado nos diz que qualquer valor mensurável é associado com um operador hermitiano.

Postulado 2.2. *Cada quantidade física mensurável x corresponde a um operador Hermitiano linear $\hat{x}$ cujos autovetores formam uma base.*

Por exemplo, se uma função $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ é dita ser “quantizada”, significa que tal no espaço de Hilbert será da forma $F(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$. Por exemplo, o operador momento linear em três dimensões é definido como

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \quad (2.4)$$

logo, o Hamiltoniano de uma dada partícula de massa m e momento $\mathbf{p}$ num potencial $V(\mathbf{r}, t)$ parte da definição clássica para a quântica por meio do operador do Hamiltoniano, como segue:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \longrightarrow \hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

Finalmente, a equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula se movendo de acordo com um dado vetor potencial $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$, também dependente do tempo, é definida como

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + \hat{V}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.6)$$

Para vetores potenciais independentes do tempo, $\hat{V} = \hat{V}(\mathbf{r})$, ao considerar a separação de variáveis do tipo $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\phi(t)$, a equação (2.6) pode ser reescrita como uma função espacial, resultando na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2.7)$$

onde E é a energia total do sistema. Observa-se que o lado esquerdo dessa equação representa a definição do operador Hamiltoniano $\hat{H}$ conforme dado na equação (2.5). Assim, reescrevendo-a na notação de Dirac com vetores de estado (eq. (2.1)), obtemos

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.8)$$

a conhecida equação de Schrödinger independente do tempo, que corresponde a um problema de autovalores e autovetores, onde $|\psi\rangle$ é um autovetor associado ao autovalor E . Em contrapartida, a denominada equação de Schrödinger dependente do tempo, derivada da parte temporal da eq. (2.6), é dada por

$$i\hbar\partial_t\phi(t) = E\phi(t), \quad (2.9)$$

cuja solução é obtida resolvendo essa equação diferencial, resultando em

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.10)$$

Assim, a solução geral para n estados de energia pode ser expressa na forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (2.11)$$

onde C_n é uma constante que depende da condição inicial $|\psi(\mathbf{r}, 0)\rangle$ do sistema e E_n é a energia de cada estado (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018).

2.2 O oscilador harmônico quântico

Definida a equação de Schrödinger, podemos calcular os autovalores (energias) e autovetores (funções de onda) de um sistema, dado o potencial em que esse está submetido. No caso do oscilador harmônico quântico (ZETTILI, 2022), estamos interessados em calcular esses valores para um vetor potencial parabólico em uma dimensão, do tipo

$$\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{x}}^2. \quad (2.12)$$

Substituindo $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})$ na eq. (2.7), teremos que

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{x}}^2 \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.13)$$

donde $\psi \equiv \psi(\hat{\mathbf{x}})$.

Para encontrar a solução dessa equação, deve-se reescrevê-la em função do operador de momento $\hat{\mathbf{p}}$, como segue

$$\frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2] |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.14)$$

em que $\frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2] = \hat{H}$, o Hamiltoniano do sistema. A ideia geral para solucionar esse problema é fatorar $\hat{H}$, mas, em geral, os operadores não comutam ($[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar$), então $\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2 \neq [-i\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2][i\hat{\mathbf{p}}^2 - (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2]$. Para solucionar esse problema, define-se as seguintes quantidades

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (-i\hat{\mathbf{p}} + m\omega\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.15a)$$

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (i\hat{\mathbf{p}} + m\omega\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.15b)$$

denominadas operadores de levantamento e abaixamento, respectivamente. Calculando o produto $\hat{a}\hat{a}^\dagger$, obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{a}\hat{a}^\dagger &= \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2 - im\omega(\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{x}})] \\
&= \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{\mathbf{p}}^2 + (m\omega\hat{\mathbf{x}})^2] - \frac{i}{2\hbar}[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}].
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Necessitamos agora determinar o valor da comutação $[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}]$. Para um caso mais geral, supondo operadores com índices diferentes, ao multiplicar a comutação por um ket qualquer, teremos que

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] |\psi\rangle &= (-\hat{\mathbf{x}}i\hbar\partial + i\hbar\partial\hat{\mathbf{x}}) |\psi\rangle \\
&= -\hat{\mathbf{x}}i\hbar\partial |\psi\rangle + i\hbar\partial(\hat{\mathbf{x}} |\psi\rangle) \\
&= -\hat{\mathbf{x}}i\hbar\partial |\psi\rangle + i\hbar(|\psi\rangle \partial\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{x}}\partial |\psi\rangle) \\
&= i\hbar |\psi\rangle,
\end{aligned} \tag{2.17}$$

logo,

$$[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar, \tag{2.18}$$

A eq. (2.18) é conhecida como a relação de comutação canônica. Substituindo-a na eq. (2.16), obtemos

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}, \tag{2.19}$$

o que resulta em

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right). \tag{2.20}$$

Realizando os mesmos passos, mas, agora, para determinar $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, chegaríamos que $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right)$, o que é igual ao resultado previamente calculado. Generalizando esses resultados e substituindo na equação de Schrödinger (eq. (2.8)), concluímos que

$$\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \tag{2.21}$$

Tendo o operador Hamiltoniano definido na eq. (2.20), queremos aplicá-lo na eq. (2.8): se $|\psi\rangle$ satisfaz a equação, então as combinações lineares $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$ também o fazem. Logo, substituindo-as, na equação, encontra-se as seguintes igualdades:

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger |\psi\rangle) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger |\psi\rangle), \tag{2.22a}$$

$$\hat{H}(\hat{a} |\psi\rangle) = (E - \hbar\omega)(\hat{a} |\psi\rangle). \tag{2.22b}$$

As eqs. (2.22) nos retornam uma forma de encontrar novas soluções para diferentes níveis de energia. Sabendo apenas uma solução, é possível determinar as demais por esses operadores. No entanto, existe um problema nesse método: não é possível aplicar

o operador de abaixamento várias vezes até uma energia que seja menor que a mínima estabelecida pelo sistema. Suponha que $|\psi_0\rangle$ seja o estado de mais baixa energia (a qual não conhecemos), então, trivialmente, ao aplicarmos o operador de abaixamento nele, teremos um estado que não existe, ou seja:

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0. \quad (2.23)$$

Substituindo a definição de $\hat{a}$ na equação, chegaremos à seguinte equação diferencial

$$\partial_x |\psi_0\rangle = -\frac{m\omega}{\hbar} x |\psi_0\rangle, \quad (2.24)$$

cuja solução é

$$\langle x|\psi_0\rangle = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (2.25)$$

em que N é o fator de normalização da solução.

Vimos anteriormente, na eq. (2.3), que, integrando no espaço o quadrado da norma da função de onda, têm-se que a probabilidade é igual a um. Para esse caso de apenas uma dimensão, teremos que

$$\begin{aligned} |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx &= 1 \\ |N|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} &= 1. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Portanto, o estado de mais baixa energia do oscilador harmônico será dado por

$$\langle x|\psi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (2.27)$$

Para determinar a energia correspondente a esse estado, basta substituir (2.27) na eq. (2.21) e utilizar que $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$, como segue:

$$\begin{aligned} \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) |\psi_0\rangle &= E_0 |\psi_0\rangle \\ \frac{\hbar\omega}{2} |\psi_0\rangle + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_0\rangle &= E_0 |\psi_0\rangle \\ \frac{\hbar\omega}{2} |\psi_0\rangle &= E_0 |\psi_0\rangle \iff E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Finalmente, a equação geral para qualquer estado de energia de um oscilador harmônico quântico, ou seja, de seus estados estacionários, será

$$\langle x|\psi_n\rangle = N_n (\hat{a}^\dagger)^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (2.29)$$

em que N_n é uma constante de normalização. Tendo as funções de onda, podemos construir o gráfico dos estados em função da posição para diferentes níveis de energia, como ilustra a Fig. 2. Aplicando o operador de levantamento mais vezes, normalizando os resultados e

substituindo-os na eq. (2.21), concluiremos que as energias dos estados estacionários do oscilador serão dadas por

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.30)$$

Note que, comparando essa última equação com a eq. (2.21), concluí-se que

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}, \quad (2.31)$$

o denominado operador número, cujo comutador dos operadores que o compõem é dado por

$$[\hat{a}\hat{a}^\dagger] \equiv \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1. \quad (2.32)$$

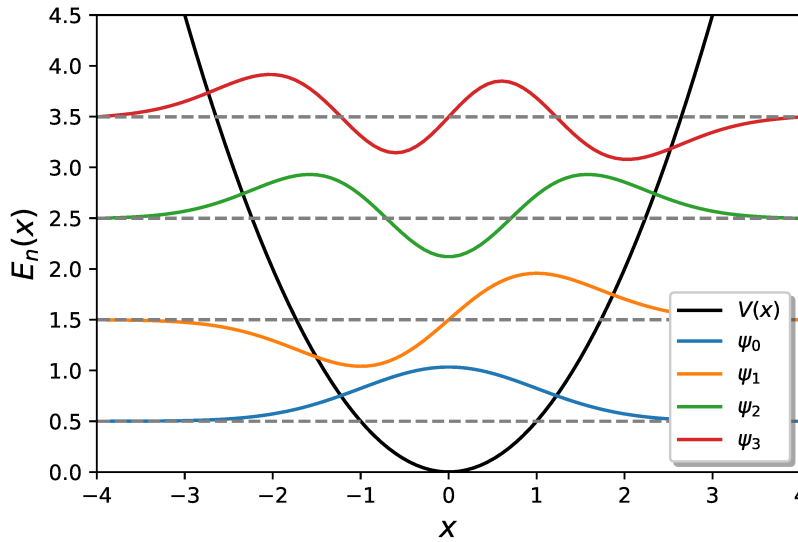


Figura 2 – Funções de onda para quatro níveis de energia de um oscilador harmônico quântico, com potencial parabólico da eq. (2.12) e m , $\hbar$ e ω em unidades atômicas. Fonte: os autores.

2.2.1 A relação entre os operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$ com os estados $|\psi_n\rangle$

Vimos que os operadores de levantamento e abaixamento, quando aplicados a um estado quântico, são proporcionais a esse, a menos de um nível $n = \pm 1$ e de uma constante de normalização, ou seja,

$$\hat{a}^\dagger |\psi_n\rangle = C_n |\psi_{n+1}\rangle, \quad (2.33a)$$

$$\hat{a} |\psi_n\rangle = D_n |\psi_{n-1}\rangle. \quad (2.33b)$$

O próximo passo para a análise desses operadores é determinar o valor das constantes C_n e D_n acima e, para isso, partimos de um estado $|n\rangle$, do qual $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, que sabemos,

pelas relações das eqs. (2.33b), que

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = C_n |n+1\rangle, \quad (2.34a)$$

$$\hat{a} |n\rangle = D_n |n-1\rangle. \quad (2.34b)$$

Da eq. (2.34b), ao multiplicarmos ambos os lados por $\langle n | \hat{a}^\dagger$, teremos

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = D_n^2 \langle n-1 | n-1\rangle = D_n^2, \quad (2.35)$$

pois $\langle n | \hat{a}^\dagger = D_n \langle n-1 |$. Mas também, pela eq. (2.31), teremos que

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \langle n | \hat{n} |n\rangle = n \langle n | n\rangle = n. \quad (2.36)$$

Portanto, igualando as eqs. (2.35) e (2.36) obteremos que

$$D_n = \sqrt{n}. \quad (2.37)$$

Realizando o mesmo passo a passo para a eq. (2.34a) chegaríamos que $C_n = \sqrt{n+1}$. Portanto, generalizamos que, dado um estado $|\psi_n\rangle$, a relação desse com os operadores de levantamento e abaixamento será

$$\hat{a}^\dagger |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle, \quad (2.38a)$$

$$\hat{a} |\psi_n\rangle = \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle, \quad (2.38b)$$

o que tornam essas soluções normalizadas. Agora, note que existe uma recursão desse método, como segue:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}} \hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 1}} (\hat{a}^\dagger)^2 |\psi_0\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{a}^\dagger |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 2 \cdot 1}} (\hat{a}^\dagger)^3 |\psi_0\rangle, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.39)$$

logo,

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle. \quad (2.40)$$

2.3 Níveis de Landau

Os níveis de energia de um elétron livre, na presença de um campo magnético uniforme muito intenso, são quantizados: o elétron experimenta uma força de Lorentz, que o faz se mover em uma trajetória circular e perpendicular ao campo aplicado. Essa

trajetória circular faz com que o elétron tenha uma energia cinética transversal, que pode ser quantizada em múltiplos de um fator fundamental $\hbar\omega_c$, em que ω_c é a frequência ciclotrônica. Portanto, os níveis de energia dos elétrons em um campo magnético são representados pelos denominados níveis de Landau (LLs) (TONG, 2016), que são rotulados por um número inteiro n , o qual indica a quantidade de fatores fundamentais $\hbar\omega_c$ que estão presentes na energia da partícula. Em resumo, todos os estados com o mesmo n formam os chamados LLs, que correspondem à dependência linear das auto-energias do sistema em função de $\mathbf{B}$, como explicita a eq. (2.48), que discutiremos mais adiante. Para visualização, o diagrama da Fig. 3 representa os LLs para um 2DEG fixado uma energia de Fermi¹ (ε_F).

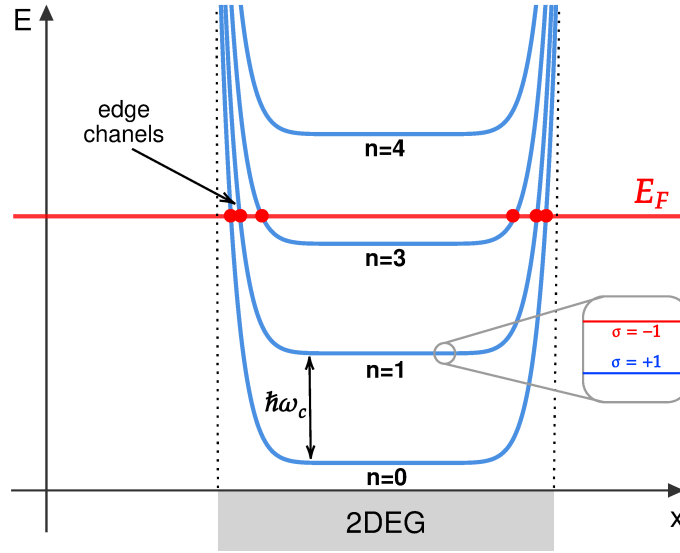


Figura 3 – LLs em um 2DEG para spins *up* e *down* separados por um fator $\hbar\omega_c$. Em um sistema finito, os elétrons não podem se mover além das bordas, e esse confinamento leva à formação de estados de borda (*edge channels*), locais esses em que a corrente flui sem dissipação. Fonte: os autores.

Essa teoria é altamente aplicada na descrição das propriedades magnéticas em semicondutores, além de estar presente no estudo da física da matéria condensada para a descrição de fenômenos como o IQHE e as oscilações de SdH. Vamos considerar dois casos de análise desse fenômeno, a priori, sem o spin dos elétrons e, a posteriori, com a interação spin-órbita. Primeiramente, no caso de uma partícula de massa m e carga $-e$, sob a presença de um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, podemos escrever seu Lagrangiano como

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - e\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}, \quad (2.41)$$

¹ A Energia de Fermi se refere ao trabalho termodinâmico que um elétron requer para saltar entre bandas de energia. É um nível de energia hipotético de um sistema, o qual está relacionado com suas propriedades eletrônicas.

em que $\mathbf{v}$ é sua velocidade e $\mathbf{A}$ o potencial vetor. A primeira parte do Lagrangiano descreve a energia cinética da partícula, enquanto a segunda, a interação dessa com $\mathbf{B}$.

Podemos usar o Lagrangiano para derivar as equações de movimento da partícula, os quais nos permitem prever sua trajetória. No caso da partícula de carga $-e$ sob $\mathbf{B}$, as equações de movimento são dadas por

$$-e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = m\dot{\mathbf{v}} \equiv m\dot{\mathbf{k}}, \quad (2.42)$$

a qual descreve a força de Lorentz. O movimento é circular, logo, calculando a frequência de circulação, concluiremos que a frequência ciclotrônica é

$$\omega_c = \frac{q\mathbf{B}}{m}. \quad (2.43)$$

O Hamiltoniano desse sistema pode ser computado canonicamente, como segue

$$H = \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2, \quad (2.44)$$

donde $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{p}$, o momento canônico. A partir de agora, o momento não será mais representado com um “chapéu” para indicar operador, logo, fica implícito que já está quantizado. Restringindo a partícula ao movimento no plano $z = 0$, a fim de obter-se uma simetria de gauge, para que o campo magnético seja $\mathbf{B} = B\hat{k}$, um possível m potencial vetor que descreve essa configuração será $\mathbf{A} = \frac{\|\mathbf{B}\|}{2}(-y, x)$.

Para facilitar a notação das relações de comutação, escrevemos o termo do Hamiltoniano como um vetor $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$, de modo que, pelo parenteses de Poisson, obtemos que a comutação entre as componentes de $\boldsymbol{\pi}$ é

$$[\pi_x, \pi_y] = -i\hbar eB. \quad (2.45)$$

Com isso, podemos definir novos operadores de modo que respeitem a comutação do oscilador harmônico, eq. (2.32):

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x - i\pi_y), \quad (2.46a)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\pi_x + i\pi_y), \quad (2.46b)$$

$$\pi_x = \sqrt{\frac{eB\hbar}{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (2.46c)$$

$$\pi_y = -i\sqrt{\frac{eB\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (2.46d)$$

Como a comutação dos operadores é idêntica a do oscilador harmônico, podemos reescrever o Hamiltoniano da eq. (2.44) em função desses novos operadores, tal que

$$H = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} = \hbar\omega_c \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.47)$$

Aplicando o mesmo método da relação dos operadores de levantamento e abaixamento com os auto-estados e, construindo o espaço de Hilbert com a equação de contorno eq. (2.23), concluiremos que a energia da partícula na presença de $\mathbf{B}$ num estado $|n\rangle$, será quantizada e similar à do oscilador harmônico quântico, como segue:

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.48)$$

Note que a separação dos níveis da Fig. 3, de $\hbar\omega_c$, deve-se exatamente ao comportamento das energias do sistema em função do campo magnético aplicado.

Como a equação de movimento, eq.(2.42), pode ser reescrita em função do espaço de momento, a área das órbitas ciclotrônicas pode ser relacionada à área no espaço de momento, dada por

$$A_k = \pi k_n^2, \quad (2.49)$$

em que k_n é raio dos orbitais nesse espaço. Essa relação pode ser entendida geometricamente pelos denominados tubos de Landau (POLYAKOV, 2012), responsáveis por gerar a esfera de Fermi. Em um 2DEG, os tubos de Landau são cilindros coaxiais em torno do campo magnético. Essa ideia geométrica surge quando se define a energia de Fermi que cruza os níveis de Landau, fazendo com que os elétrons de cada banda n fiquem confinados a folhas, representadas por tubos na esfera de Fermi. Os auto-estados de um sistema, na presença de um campo magnético, vão remodelar a superfície de Fermi em anéis concêntricos, como ilustra a Fig. 4. Ao variar a intensidade do campo aplicado, o tubo mais externo é expandido ao ponto de cruzar a esfera de Fermi, o que leva a um aumento na DOS. Resumindo, a cada vez que um dos tubos de Landau cruzam essa esfera, a DOS apresenta um máximo, o que causa as oscilações na condutividade do material, com periodicidade $1/B$, como veremos mais a frente na equação de Lifshitz-Kosevich (LK) (LIFSHITS; KOSEVICH, 1958).

2.4 Shubnikov-de Haas

Nesta seção, iremos abordar a origem qualitativa das oscilações de SdH, introduzindo a teoria do modelo de Drude para cálculo de transporte em materiais bidimensionais no regime do HE e do IQHE, e, também, da fase de Berry. Abordar-se-á a aproximação analítica para esse fenômeno, a fórmula de LK, e as relação entre a DOS, densidade eletrônica e nível de Fermi para cálculo de SdH.

2.4.1 Efeitos Hall: o modelo de Drude

Considere o seguinte sistema: um 2DEG de tamanho limitado (um quadrado de lado L , por exemplo), em que aplica-se uma corrente constante I na direção $\hat{x}$. Ao incidir um campo magnético $\mathbf{B}$ na direção normal à da superfície, uma tensão V_H em $\hat{y}$ é induzida.

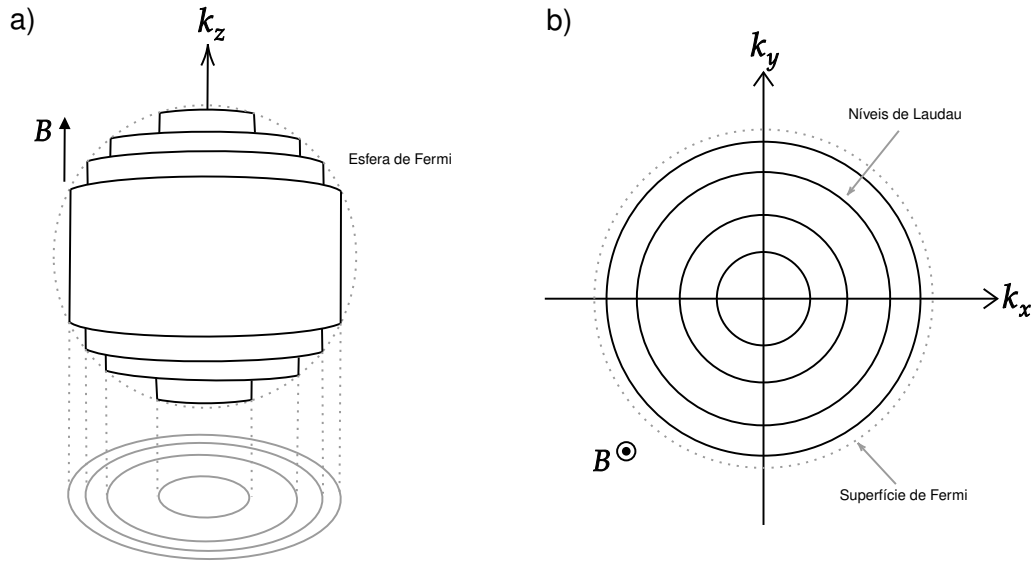


Figura 4 – (a) Tubos de Landau encerrados pela superfície de Fermi e em (b) os níveis de Landau como a projeção desses tubos no espaço bidimensional de momento. Fonte: os autores.

O que queremos saber é o que causou essa tensão, denominada tensão Hall, e como a condutividade e a resistividade, longitudinais e transversais, no sistema, se comportam em relação à variação de $\mathbf{B}$. Vimos, anteriormente, que os elétrons irão presenciar uma força de Lorentz e realizar órbitas ciclotrônicas, com frequência ω_c , força essa que dá origem a V_H . Vamos, agora, introduzir um modelo mais completo para representar o comportamento dos elétrons num sistema bidimensional como esse.

O modelo de Drude, em homenagem ao físico suíço Paul Drude, consiste em uma esquematização clássica do comportamento eletrônico em um metal condutor (TONG, 2016). Diferentemente da eq. (2.42), vamos, agora, introduzir um termo de campo elétrico $\mathbf{E}$, que, na ausência de $\mathbf{B}$, pode gerar uma corrente na sua direção e um termo linear de fricção, representando as colisões entre os elétrons e as possíveis impurezas no material. Sendo assim, temos a seguinte relação

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{E} - e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{m\mathbf{v}}{\tau}, \quad (2.50)$$

em que τ é denominado tempo de relaxação do momento, o qual está relacionado com o tempo médio entre as colisões dos elétrons. Estamos interessados em soluções de equilíbrio, ou seja, quando $\dot{\mathbf{v}} = 0$, isto é, quando a relação da eq. (2.51) é satisfeita:

$$\mathbf{v} + \frac{e\tau}{m}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = -\frac{e\tau}{m}\mathbf{E}. \quad (2.51)$$

Dado a densidade de corrente $\mathbf{J} = -ne\mathbf{v}$, sendo n a densidade de livre portadores de carga, reescrevemos a eq. (2.51) na forma matricial como

$$\mathbf{J} = \varsigma \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau \\ \omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \mathbf{E}, \quad (2.52)$$

em que $\varsigma = e^2 n \tau m^{-1}$. Pela lei de Ohm, sabemos que $\mathbf{J} = \overleftrightarrow{\sigma} \mathbf{E}$, em que $\overleftrightarrow{\sigma}$ é o tensor de condutividade. Ao aplicar um campo magnético num sistema bidimensional, a condutividade passa de ser uma constante para um tensor, que representaremos na forma²

$$\overleftrightarrow{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}. \quad (2.53)$$

Comparando as eqs. (2.52) e (2.53), retiramos informações à respeito das condutividades no material, em especial, $\sigma_{xy} = -ne^3 \tau^2 m^{-2} B$, a denominada condutividade Hall, responsável pelo aparecimento de uma tensão perpendicular à direção da corrente aplicada.

Vamos, agora, estudar a resistividade, definida como o inverso da condutividade, que, seguindo a mesmo procedimento acima, nos retorna

$$\overleftrightarrow{\rho} = [\overleftrightarrow{\sigma}]^{-1} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ -\rho_{xy} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \equiv \frac{m}{ne^2 \tau} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Da relação acima, retiramos duas informações de extrema importância que caracterizam o modelo de Drude: a resistividade longitudinal e a resistividade Hall, dadas por

$$\rho_{xx} = \frac{m}{ne^2 \tau}, \quad (2.55a)$$

$$\rho_{xy} = \frac{B}{ne}. \quad (2.55b)$$

Um fator que comprova o aparecimento de V_H é que a resistência nessa direção é finita e igual a $-\rho_{xy}$, pois

$$R_{xy} = V_y / I_x = L E_y / L J_x = -\rho_{xy}. \quad (2.56)$$

Além disso, nota-se que a resistividade longitudinal mantém-se constante em relação ao campo magnético $\mathbf{B}$, ao passo que a resistividade Hall demonstra uma relação linear, como ilustra o gráfico da Fig. 5.

Até o momento, tratamos do problema utilizando cálculos clássicos, mas, na mecânica quântica, esse efeito se mantém o mesmo? É possível determinar as resistividades da mesma forma? A resposta está na descoberta experimental de Klaus von Klitzing em 1980, o Efeito Hall Quântico Inteiro (IQHE) (KLITZING, 1986). O experimento de von Klitzing envolveu amostras de semicondutores de silício na presença de forte

² Note que estamos denotando $\sigma_{yx} = -\sigma_{xy}$. No EH, essa aproximação é válida devido à simetria de Onsager, a qual diz que a resposta do material à aplicação de um campo magnético deve ser simétrica em relação à direção desse.

campo magnético e baixas temperaturas. As resistividades foram medidas variando-se a intensidade do campo aplicado. À medida que esse tomava valores mais intensos, $B \gg 1$ T, ocorreu uma descoberta surpreendente: a resistividade Hall não variou de forma linear, como previa o modelo de Drude, mas, em vez disso, exibiu uma série de platôs, enquanto que a resistividade linear começou a oscilar. von Klitzing encontrou que a resistividade Hall era dada por

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu}, \quad \nu \in \mathbb{Z}, \quad (2.57)$$

em que ν representa o fator de preenchimento (*ff*: *filling factor*, do inglês), ou seja, o número de platôs do sistema, os quais têm relação com o número de LLs ocupados por elétrons, como ilustra a Fig. 6.

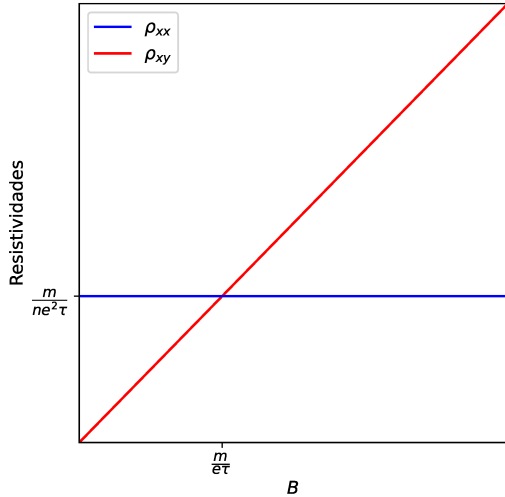


Figura 5 – Resistividades no efeito Hall. Os valores destacados nos eixos indicam o valor da resistividade longitudinal (constante em B) e o valor do campo em que as resistividades possuem mesma magnitude. Fonte: os autores.

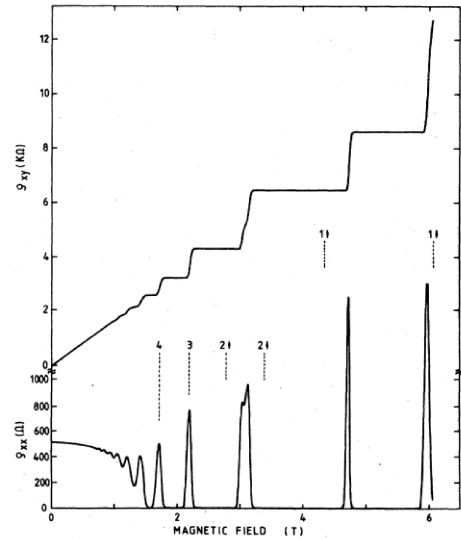


Figura 6 – Resistividades no regime do IQHE. Para $B \approx 0$, o comportamento das resistividades é semelhante ao do HE. Conforme B aumenta, a resistividade longitudinal começa a oscilar de acordo com os platôs que a resistividade Hall exibe. Fonte: (KLITZING, 1986).

Comparando as eqs. (2.55b) e (2.57), vemos que a densidade necessária para obter a resistividade de um certo platô ν é

$$n = \frac{B}{\Phi_0} \nu, \quad (2.58)$$

em que $\Phi_0 = h/e$. Essa quantidade representa a densidade de elétrons n_s para preencher ν LLs.

Calculamos, anteriormente, a condutividade pela forma clássica, partindo da lei de Ohm. Calcularemos, agora, por princípios da mecânica quântica: dado um elétron com momento $\mathbf{p}$, na direção $\hat{x}$, sob a influência de um campo magnético externo, a corrente relacionada será dada por $\mathbf{I} = -e\dot{\mathbf{x}}$, totalizando uma corrente total igual a

$$\mathbf{I} = -\frac{e}{m} \sum_{\text{filled states}} \langle \psi | -i\hbar\nabla + e\mathbf{A} | \psi \rangle. \quad (2.59)$$

Com todos os ν LLs ocupados, a corrente na direção $\hat{x}$ é igual a zero, enquanto que a corrente na direção $\hat{y}$, devido a presença do campo elétrico na direção $\hat{x}$, será dada por

$$I_y = -\frac{e}{\nu} \sum_k \frac{E}{B}. \quad (2.60)$$

Dado que $J_y = I_y/L^2$, e a soma em k resulta o número de elétrons $n = L^2 B/\Phi_0$, então

$$J_y = \frac{I_y}{L^2} = -e\nu \frac{E}{B} \frac{1}{L^2} = -e\nu \frac{E}{\Phi_0}. \quad (2.61)$$

Em resumo, aplicando $\mathbf{E}$ na direção $\hat{x}$, obtemos uma densidade de corrente em $\hat{y}$ dada por $J_y = -e\nu E/\Phi_0$, isto é

$$\mathbf{J} = \overset{\leftrightarrow}{\sigma} \mathbf{E} \implies \begin{pmatrix} 0 \\ -e\nu E/\Phi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

Concluimos então que

$$\sigma_{xx} = \rho_{xx} = 0, \quad (2.63a)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e\nu}{\Phi_0} \implies \rho_{xy} = -\frac{\Phi_0}{e\nu} = \frac{h}{e^2\nu}. \quad (2.63b)$$

Comparando as Figs. 5 e 6, vemos que para valores em que $B \rightarrow 0$, temos o regime clássico, e, à medida que o campo aumenta, os efeitos de quantização começam a aparecer. O regime intermediário entre esses dois cenários são exatamente as oscilações de SdH, que foram analisadas analiticamente pela equação de LK, a qual discutiremos mais adiante. Na presença de campo magnético, a DOS é dada por distribuições do tipo delta-Dirac centradas nos LLs, com diferença de energia ε entre níveis n de spin $\sigma = \pm 1$:

$$g_{2D}(\varepsilon, B) = \frac{eB}{h} \sum_{n, \sigma=\pm} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n^\sigma). \quad (2.64)$$

Note que o termo de normalização, $n_L = eB/h$, corresponde ao número de estados k permitidos por unidade de área do sistema, ou seja, representa a degenerescência dos LLs. Isso ocorre porque B confina os elétrons em órbitas de comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, e é justamente desta definição que obtemos o $\mathcal{f}$ do IQHE: em um material com densidade de elétrons n_s , o número $\nu = n_s/n_L$ nos diz respeito a quantos LLs estão

ocupados a um certo valor de B . A essa grandeza, denominamos o fator que os LLs estão preenchidos, o ν , dado por

$$\nu = \frac{\hbar n_s}{eB}. \quad (2.65)$$

Voltando à densidade de estados, para valores de B muito pequenos, o número de LLs ocupados é grande, e dado por $\nu = \varepsilon_F / \hbar \omega_c$, sendo ε_F a energia de Fermi. Isso significa que, para esses valores de B , os LLs diminuem sua separação. Na presença de impurezas, a degenerescência dos LLs é quebrada, resultando no alargamento da DOS. Devido a isso, em 1974, o físico Tsuneya Ando desenvolveu um método mais preciso para calcular a DOS dos níveis de Landau, baseando-se num modelo numérico perturbativo, evidenciando a distinção de estados estendidos e localizados (TONG, 2016), que serão discutidos em mais detalhes na próxima seção referente ao modelo de Prange (PRANGE, 1981). Com essa descrição teórica, a DOS, agora, pode ser escrita como

$$g_{2D} = \frac{eB}{h\Gamma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_n^\sigma)^2}{2\Gamma^2}\right\}, \quad (2.66)$$

sendo Γ a largura da distribuição, dada por

$$\Gamma = \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2B}{\pi\mu}} \approx \Gamma_0 \sqrt{B}, \quad (2.67)$$

em que μ é a mobilidade dos elétrons do modelo de Drude. O termo aproximativo Γ_0 especifica, em meV, o alargamento da DOS.

2.4.2 Modelo de Prange

O modelo fenomenológico para descrever o comportamento das magneto-resistividades em sistemas bidimensionais é baseado no argumento de Prange (PRANGE, 1981; FERREIRA, 2011). Esse modelo reside no estudo de como as densidades de estados dos elétrons afetam a condutividade e a formação de platôs na resistividade Hall. Prange argumentou que, nesses sistemas, a corrente é transportada, principalmente, por estados estendidos, enquanto que os estados localizados não contribuem diretamente para o transporte de corrente³. Em vez disso, os estados localizados provocam uma dissociação na corrente que é compensada pelos estados estendidos, garantindo que a corrente total seja mantida. Para descrever isso quantitativamente, o modelo utiliza duas DOS, a total e a efetiva. A primeira considera todos os estados disponíveis no sistema, incluindo o alargamento causado pelo espalhamento de impurezas. Esse alargamento é descrito por uma distribuição gaussiana,

³ Os estados localizados geralmente estão associados a uma distribuição gaussiana com uma largura maior, devido ao alargamento provocado por impurezas ou defeitos no material. Esse alargamento maior reflete a capacidade limitada desses estados em se moverem livremente, e sua tendência a se concentrarem em regiões específicas do material. Já os estados estendidos estão associados a uma distribuição gaussiana mais estreita, haja vista que eles têm maior mobilidade e não estão tão influenciados por impurezas, localizando-se nas regiões centrais das distribuições gaussianas da DOS.

como já comentado, e com uma largura que é proporcional a $\mathbf{B}$ (vide eq. (2.67)). Já a efetiva, reflete os estados estendidos que, efetivamente, participam do transporte eletrônico. É também uma distribuição gaussiana, mas com um alargamento menor, que é justificado com base na comparação de experimentos e na necessidade de simular a compensação da corrente. A Fig. 7 representa esquematicamente a diferença entre os alargamentos da DOS.

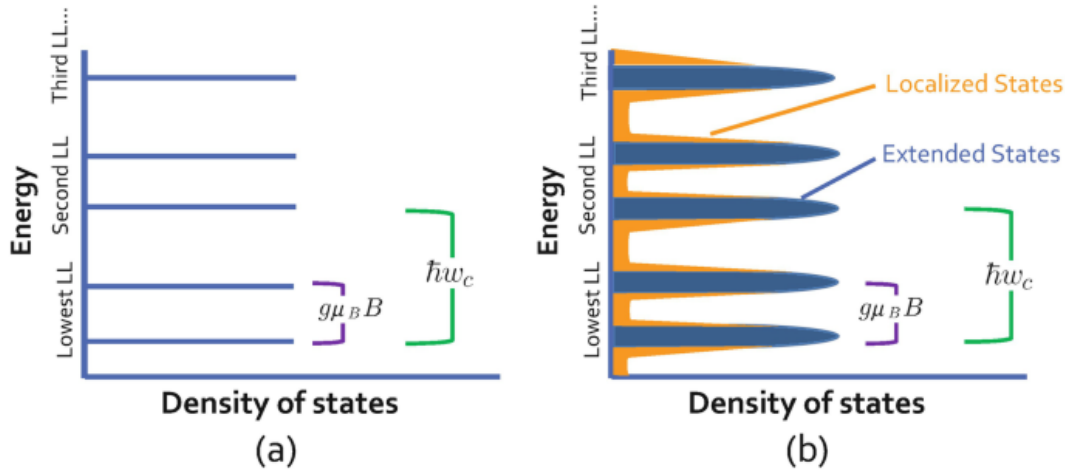


Figura 7 – (a) Representação da separação dos LLs pela energia do ciclotron, $\hbar\omega_c$, e cada nível dividido pela energia de Zeeman, $g\mu_B B$ (ramo de spin *up* e *down*). (b) A desordem amplia os níveis de energia, dando origem a estados estendidos que contribuem para a condução de corrente (azul) e estados localizados que não contribuem (laranja). Fonte: (SCHREIBER, 2019).

O modelo de Prange considera que a densidade de estados efetiva é crucial para calcular a resistividade. A diferença entre os estados localizados e entendidos é importante para obter resultados que reproduzam as observações experimentais, como os platôs na resistividade Hall, que surgem quando todos os estados estendidos de um nível de Landau estão ocupados e a corrente não varia com a ocupação dos estados localizados. Este comportamento é consistente com o do IQHE observado experimentalmente, onde a condutividade é quantizada e a resistividade longitudinal apresenta picos. Os coeficientes de magneto-transporte são calculados substituindo a DOS efetiva nas fórmulas de Ando (ANDO; FOWLER; STERN, 1982), que consideram tanto a densidade total de estados, quanto a contribuição dos estados estendidos para o transporte. As equações resultantes garantem que o modelo reproduza tanto o IQHE, quanto os resultados clássicos em campos magnéticos menos intensos.

2.4.3 A equação de Lifshits-Kosevich

A equação de LK é um formalismo analítico utilizado para descrever as oscilações de SdH em sistemas bidimensionais. Ela foi desenvolvida por Evgeny Lifshitz e Igor Kosevich entre 1956 e 1957 em estudos baseados em 2DEGs. A oscilação da condutividade pode ser expressa como

$$\Delta\sigma_{xx} \propto 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l\lambda}{\sinh(l\lambda)} e^{-l\tau/\tau_0} \cos \left[2\pi l \left(\frac{F}{B} - \frac{1}{2} + \phi \right) \right], \quad (2.68a)$$

$$\lambda = \frac{4\pi^3 \hbar k_B T}{eB} g(\varepsilon_F), \quad (2.68b)$$

$$\tau = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{eB} g(\varepsilon_F), \quad (2.68c)$$

$$F = \frac{2\pi \hbar}{e} n_{2D}(\varepsilon_F), \quad (2.68d)$$

em que $\Delta\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(B) - \sigma_{xx}(0)$ é a variação da condutividade longitudinal para campo magnético finito e igual a zero, tanto como para um harmônico l e spin $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$. Nessa forma, o termo dependente da temperatura λ e o fator *Dingle* τ são calculados em termos da DOS no nível de Fermi ($g(\varepsilon_F)$). Já o termo da frequência F é escrito em termos da densidade de cargas, dada por

$$n_{2D}(\varepsilon_F) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.69)$$

a qual determina as oscilações de SdH, que são proporcionais a $1/B$. A fase ϕ é o termo, o qual, diferencia se o material em estudo possui bandas lineares ou parabólicas. Para materiais em que a dependência da temperatura reside em $T \approx 0$ K, o primeiro termo que carrega a exponencial e o seno hiperbólico tende a um (FERREIRA et al., 2022; ANDO, 2013).

Portanto, fica evidente que a equação de LK é muito complexa e contém muito pré-fatores a serem trabalhados, dependendo do sistema em estudo, e de quais harmônicos compõem a frequência das oscilações. Essa aproximação, para as oscilações da condutividade/resistividade, modelam muito bem problemas clássicos, como um 2DEG ou outros sistemas metálicos. No entanto, para TIs, descritos por Hamiltonianos lineares em $\mathbf{k}$ (tipo Dirac), o formalismo das equações de LK não modelam o sistema sem que aproximações muito bruscas sejam realizadas. Antes de iniciarmos a análise qualitativa, obtida numericamente, é preciso entender como essa fase ϕ é necessária para calcular a fase de Berry. Vale ressaltar, também, que em todos os cálculos desse trabalho, a resistividade foi obtida pela modelo fenomenológico utilizando Drude e a primeira aproximação de Born, que resulta na proporcionalidade à DOS, temas que veremos a seguir.

2.4.4 Fase de Berry

Materiais que não possuem estrutura de bandas com topologia trivial, adicionam uma correção de fase aos padrões de oscilação quântica, a qual é conhecida como fase de Berry (ZHAO; WANG, 2022). Considere $\mathbf{R}(t)$ um vetor no espaço de parâmetros, que depende do tempo e do n -ésimo estado do sistema, descrito pelo Hamiltoniano H . Logo, a equação de Schrödinger pode ser escrita como

$$H(\mathbf{R}(t)) |n, \mathbf{R}(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (2.70)$$

Suponha, agora, que $\mathbf{R}$ muda adiabaticamente do estado inicial em $t = 0$, dado por $\mathbf{R}_0$. Logo, a evolução temporal desse vetor será escrita como

$$H(\mathbf{R}(t)) |n, t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, t\rangle, \quad (2.71)$$

em que o estado, a qualquer momento t , é dado por

$$|n, t\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t L_n[\mathbf{R}(t')] dt'\right\} |n, \mathbf{R}(t)\rangle, \quad (2.72)$$

donde obtemos, substituindo a eq. (2.72) na (2.71), que

$$L_n[\mathbf{R}(t)] = i\hbar \dot{\mathbf{R}}(t) \langle n, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle - E_n(\mathbf{R}(t)), \quad (2.73)$$

em que $L_n[\mathbf{R}(t)]$ representa um operador, o qual está relacionado à energia do sistema e à fase adquirida. Isso nos leva à conclusão que

$$\begin{aligned} |n, t\rangle = \exp\left\{-\int_0^t \dot{\mathbf{R}}(t') \langle n, \mathbf{R}(t') | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t') \rangle dt'\right\} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt'\right\}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Nesta expressão para o n -ésimo estado dependente do tempo, a primeira exponencial representa o efeito não trivial da fase acumulada durante a evolução temporal, enquanto que a segunda exponencial representa o termo trivial, denominado termo dinâmico.

Quando $\mathbf{R}$ circula um caminho C , num intervalo de tempo de $t = 0$ a $t = T$, a fase de Berry γ_n é definida pelo termo não-trivial da fase acumulado, como

$$\begin{aligned} \gamma_n &= i \int_0^T \dot{\mathbf{R}}(t') \cdot \langle n, \mathbf{R}(t') | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t') \rangle dt' \\ &= i \oint_C \langle n, \mathbf{R}(t') | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t') \rangle d\mathbf{R} \\ &= - \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ &= - \int_S \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{S}. \end{aligned} \quad (2.75a)$$

Por meio dessas equações, definimos a conexão de Berry como

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle, \quad (2.76)$$

e sua rotação na curvatura de Berry como

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}). \quad (2.77)$$

Portanto, o significado da fase de Berry reside no fator de fase acumulada em um sistema quântico, após completar um caminho fechado no espaço de parâmetros. A conexão de Berry corresponde ao campo de Gauge, como por exemplo, similar ao potencial vetor do campo magnético no espaço real.

A conexão de γ com SdH é, que medidas nas oscilações quânticas em materiais, para valores de campo magnético baixo, extraem o valor de γ por meio da fase ϕ , proveniente da equação de LK. Do termo oscilatório, proporcional a

$$\cos \left[2\pi l \left(\frac{F}{B} - \frac{1}{2} + \phi \right) \right], \quad (2.78)$$

é possível obter os mínimos N de oscilação, igualando-o a -1 , isto é, quando o argumento do cosseno é mínimo, ou seja, um múltiplo de $(2N + 1)\pi$. Fazendo essas substituições na eq. (2.68), para uma única sub-banda, e considerando apenas o primeiro harmônico, chegaremos que a periodicidade de SdH, $1/B$, em função dos mínimos N , é

$$\frac{1}{B} = \frac{N}{F} - \frac{\phi}{F}. \quad (2.79)$$

O coeficiente angular dessa relação nos retorna $1/F$, a frequência de oscilação, enquanto que o ponto em que $1/B = 0$ nos retorna a fase, dada por $\phi = N \bmod 1$, pois a função cosseno é periódica em 2π . Com isso, retiramos o valor da fase de Berry, dada por

$$\gamma_N \equiv \frac{\phi}{2\pi} = \frac{N \bmod 1}{2\pi}. \quad (2.80)$$

Essa relação nos retorna que, dada as oscilações de SdH em um material, é possível determinar a frequência e a fase de Berry desse tirando-os por meio da relação de $1/B$ em função dos índices de mínimo N da oscilação. Materiais que possuem estrutura de bandas lineares (tipo Dirac), possuem $\phi = 1/2$, enquanto que materiais com bandas parabólicas possuem $\phi = 0$ (ANDO, 2013).

2.4.5 Densidade de estados via modelo de Drude

Como já discutido anteriormente, para pequenos valores de campo magnético, temos uma descrição semiclássica das oscilações de SdH, como por exemplo o IQHE. Essa descrição parte de que a mobilidade eletrônica μ pode ser expressa em termos da densidade n como

$$\mu = \frac{e\tau}{m} = \frac{1}{en\rho_{xx}}, \quad (2.81)$$

sendo τ o tempo de relaxação do momento e ρ_{xx} a resistividade longitudinal. A partir dessa igualdade, concluímos que a resistividade é proporcional ao inverso do tempo de relaxação,

considerando-se que a densidade eletrônica é constante. Vamos, agora, demonstrar que, para cálculos de transporte eletrônico, a partir dessa proporcionalidade, podemos reescrever a resistividade em função da DOS. Ao utilizarmos uma abordagem semiclássica, levaremos em conta, via uma expansão em série de Taylor, a dependência do campo magnético na condutividade por $\tau(\varepsilon, B)$, que é proporcional a DOS. Em uma primeira aproximação de Born⁴ (BARGE, 2012; ANDO; UEMURA, 1974),

$$\tau(\varepsilon, 0)^{-1} = \alpha g(\varepsilon, 0), \quad (2.82)$$

em que α é uma constante de proporcionalidade. Expandindo $\tau(\varepsilon, B)^{-1}$ por Taylor em torno de $B = 0$, e utilizando a aproximação das diferenças finitas, isto é, que $g'(\varepsilon, 0) \approx [g(\varepsilon, B) - g(\varepsilon, 0)]/B \approx \Delta g(\varepsilon, B)/B$, obteremos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\varepsilon, B)} &\approx \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} + B \left[\frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} \right]', \\ &\approx \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} + B \alpha g'(\varepsilon, 0), \\ &\approx \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} + \alpha \Delta g(\varepsilon, B), \end{aligned} \quad (2.83)$$

Do modelo de Drude, eq. (2.55a), aplicando essa aproximação, a resistência longitudinal pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \rho_{xx}(\varepsilon, B) &= \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} + \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\alpha} \Delta g(\varepsilon, B), \\ &\approx \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)} + \frac{m}{ne^2} \frac{1}{\tau(\varepsilon, 0)g(\varepsilon, 0)} \Delta g(\varepsilon, B), \\ &\approx \rho_{xx}^0 \left(1 + \frac{\Delta g(\varepsilon, B)}{g(\varepsilon, 0)} \right), \end{aligned} \quad (2.84)$$

em que $\rho_{xx}^0 = m/ne^2\tau(\varepsilon, 0)$. Calculando a variação da magneto-resistividade, ou seja, $\Delta\rho_{xx}$, obtemos

$$\Delta\rho_{xx}(\varepsilon, B) = \frac{\rho_{xx}(\varepsilon, B) - \rho_{xx}(\varepsilon, 0)}{\rho_{xx}(\varepsilon, 0)} = \frac{\Delta g(\varepsilon, B)}{g(\varepsilon, 0)}. \quad (2.85)$$

Caso a densidade seja constante, vale que a magneto-resistividade para cálculos de fenômeno de transporte pode ser obtida via DOS pela eq. (2.85) sem perda de acurácia. A partir agora, todos os cálculos deste trabalho de conclusão de curso levarão em conta tal aproximação.

⁴ A primeira aproximação de Born é utilizada para calcular a probabilidade de transições entre estados quânticos em sistemas onde a interação perturbativa é fraca. Em termos matemáticos, a taxa de espalhamento (ou de transição) de um estado inicial $|i\rangle$ para um estado final $|f\rangle$, devido a uma perturbação V , é dada por $\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i|V|f\rangle|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f)$. A origem desse cálculo reside na regra de ouro de Fermi, regra essa a qual afirma que, quando a interação é suficientemente pequena para que efeitos de ordem superior possam ser negligenciados, vale que $\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f) \approx g(\varepsilon_f)$. O valor analítico da primeira aproximação de Born pode ser extraído via funções de Green ou relação de Einstein para a condutividade (FERREIRA, 2011).

2.5 Modelo BHZ: análise via simetrias e método dos invariantes

Como já discutido na introdução desse trabalho, um dos primeiros modelos efetivos para cálculos eletrônicos em TIs foi o BHZ. Nessa seção, iremos determinar tal modelo de Hamiltoniano utilizando simetrias da teoria de grupos. Bernevig, et.al, (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006) demonstrou em seus estudos que, a hetero-estrutura composta por CdTe/HgTe/CdTe, possui uma transição de fase quântica topológica (inversão de bandas) entre a fase do estado isolante convencional da exibida no efeito Hall quântico de spin, quando variava-se a espessura do poço quântico de HgTe. A priori, a base do estudo de simetrias e da teoria de perturbações em semicondutores, denominada método $k \cdot p$, mostra que, os estados eletrônicos próximos do ponto Γ num cristal, são descritos pela equação relativística de Dirac. O material da barreira (*lead*) CdTe possui uma progressão trivial de bandas, com a do tipo-s, Γ_6 , logo acima da do tipo-p, Γ_8 , enquanto que o poço de HgTe possui uma progressão inversa. Para determinarmos o modelo efetivo desse sistema, desconsideramos o *split-off* da banda Γ_7 , pois ela não contribui efetivamente para os cálculos de transporte. Ambos materiais são do tipo *zincblend*, e a simetria desses é descrita pelo grupo $T_d = \{e, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d\}$ ⁵. A Fig. 8 ilustra o *bulk* das bandas nesses materiais, assim como a dispersão da energia de acordo com a espessura crítica d_c do poço quântico (WINKLER, 2003).

A banda do tipo-s, Γ_6 , possui spin $s = 1/2$ na base ($\uparrow, \downarrow$) e momento angular $l = 0$. As bandas do tipo-p, Γ_7 e Γ_8 , provêm da soma de momento angular total $j = 1 + 1/2$, que pode resultar em $3/2 \rightarrow \Gamma_8$ ou em $1/2 \rightarrow \Gamma_7$. Assim, definimos a base desse sistema restrito a um modelo de seis bandas por unidade de célula, combinadas com seis componentes de *spinor*, na seguinte forma:

$$\Psi = (|\Gamma_6, 1/2\rangle, |\Gamma_6, -1/2\rangle, |\Gamma_8, 3/2\rangle, |\Gamma_8, 1/2\rangle, |\Gamma_8, -1/2\rangle, |\Gamma_8, -3/2\rangle). \quad (2.86)$$

A direção cristalográfica considerada é a $z = [001]$, que corresponde ao eixo de rotação das operações S_4 . Ao desconsiderar os efeitos da banda Γ_7 , o que nos leva à base restrita de seis vetores, quebramos algumas simetrias do grupo T_d , o que implica a descrição do poço quântico, em si, pelas simetrias do grupo $D_{2D} = \{e, 2S_4, C_2, C'_2, 2\sigma_d\}$ ⁶. O modelo

⁵ O grupo de simetria T_d é o grupo de simetria do tetraedro regular e contém os seguintes elementos: A identidade e , que mantém todos os pontos invariantes; oito rotações C_3 , que correspondem a rotações de 120° e 240° em torno dos quatro eixos que passam pelos vértices do tetraedro e pelo centro oposto; três rotações C_2 , que são rotações de 180° em torno dos eixos que passam pelos pontos médios das arestas opostas do tetraedro; seis rotações S_4 , que combinam uma rotação de 90° ou 270° seguida de uma reflexão em um plano perpendicular ao eixo de rotação; e seis planos de reflexão σ_d , que refletem os pontos em relação a planos diagonais que contêm uma aresta e o ponto médio da aresta oposta.

⁶ O grupo de simetria D_{2d} é composto pelos seguintes elementos: A identidade e , que mantém todos os pontos invariantes; duas rotações S_4 , que consistem em uma rotação de 90° seguida de uma reflexão em um plano perpendicular ao eixo de rotação; uma rotação C_2 , que corresponde a uma rotação de

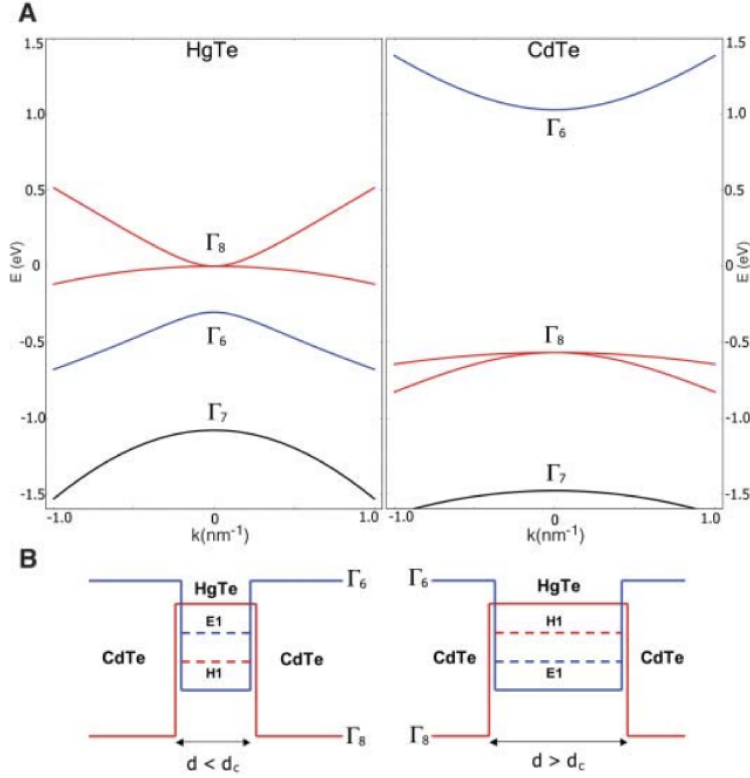


Figura 8 – (a) Estrutura de bandas para HgTe e CdTe próximas do ponto Γ ; (b) As energias da banda de elétrons, E , e da banda de buracos, H , no poço quântico da hetero-estrutura CdTe/HgTe no regime trivial, $E_1 > H_1$, e no regime inverso, $E_1 < H_1$. Fonte: (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006).

para o *zincblende* do CdTe e do HgTe é o de Kane 8×8 , dado por

$$\begin{aligned}
 H_{Kane} = & \left[H_0 + H_z k_z + H_{zz} k_z^2 \right] \\
 & + \left[H_+ + H_+ k_z + k_z H_{z+} \right] \\
 & + \left[H_- + H_- k_z + k_z H_{z-} \right] k_- \\
 & + H_{xx} k_x^2 + H_{yy} k_y^2 + H_{xy} k_x k_y.
 \end{aligned} \tag{2.87}$$

Por simplicidade, consideramos que $k_x = k_y = 0$, o que nos retorna apenas $H'_{Kane} = H_0 + H_z k_z + H_{zz} k_z^2$, que é 4×4 . O termo H_0 , separa-se em blocos 1×1 e 2×2 , o que implica que podemos separar a base inicial Ψ em auto-estados de spin *up* e *down* para as bandas de elétron e buraco da seguinte forma:

$$|\Psi_{E_1^+}\rangle = C_6(z) |\Gamma_6, \uparrow\rangle + C_4(z) |\Gamma_8, \uparrow\rangle \tag{2.88a}$$

$$|\Psi_{H_1^+}\rangle = C_8(z) |\Gamma_8, \uparrow\rangle. \tag{2.88b}$$

O mesmo se aplica para $|\Psi_{E_1^-}\rangle$ e $|\Psi_{H_1^-}\rangle$, o que formam pares de Kramer, conectados pela simetria de reversão temporal. Precisamos, agora, estudar as paridades das funções

180° em torno do eixo principal do sistema; uma rotação C'_2 , que representa uma rotação de 180° em torno de um eixo secundário perpendicular ao eixo principal; e dois planos de reflexão diagonais σ_d , que refletem os pontos em relação a planos inclinados a 45° em relação aos eixos principais do sistema.

envelope $C_6(z)$ e $C_4(z)$. Pela simetria da função de onda, sabemos que $C_8(z)$ é par. Já o conjunto $\{|\Gamma_6, \uparrow\rangle, |\Gamma_8, \uparrow\rangle\}$ possui acoplamento linear em k_z , o que implica que as paridades são obrigatoriamente opostas (ROTHE et al., 2010).

Os estados $|\Psi_{E_1^\pm}\rangle$ e $|\Psi_{H_1^\pm}\rangle$ são funções de base para o modelo BHZ. Vamos, então, determinar a paridade das funções envelope analisando como esses estados se transformam perante o grupo D_{2D} . As IRREPS dos grupos duplos T_d e D_{2D} , haja vista que estamos trabalhando com uma base de spinors, estão representadas nas Tabs. 1 e 2 (KOSTER, 1957):

Tabela 1 – IRREPS do grupo duplo T_d .

T_d	e	$\bar{e}$	$8C_3$	$8\bar{C}_3$	$3C_2, 3\bar{C}_2$	$6S_4$	$6\bar{S}_4$	$6\sigma_d, 6\bar{\sigma}_d$
Γ_6	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	4	-4	-1	1	0	0	0	0

Tabela 2 – IRREPS do grupo duplo D_{2d} .

D_{2d}	e	$\bar{e}$	$C_2, \bar{C}_2$	$2S_4$	$2\bar{S}_4$	$2C'_2, 2\bar{C}'_2$	$2\sigma_d, 2\bar{\sigma}_d$
X_6	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
X_7	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

Percebe-se, pelas tabelas acima, que as relações de compatibilidade entre as IRREPS são dadas por

$$\Gamma_6 \longrightarrow X_6, \quad (2.89)$$

$$\Gamma_7 \longrightarrow X_7, \quad (2.90)$$

$$\Gamma_8 \longrightarrow X_6 \oplus X_7. \quad (2.91)$$

Os geradores desses grupos são as operações S_4 e C'_2 , mas, como essa última possui representações iguais a zero, vamos apenas considerar como S_4 atua nos elementos desse grupo, definido como

$$S_4(z) = I \cdot C_4^{-1} \equiv C_4 \cdot M_z = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_z}, \quad (2.92)$$

sendo M_z um *mirror* no eixo $\hat{u} = z$ e $C_4^{-1} \equiv R_z(-\pi/2)$ o operador de rotação de spin, definido como

$$R_{\hat{u}}(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}}. \quad (2.93)$$

Para escrever as representações dessas operações no grupo, utilizaremos o métodos dos invariantes via pacote QSYMM do Python (VARJAS; ROSDAHL; AKHMEROV, 2018). Esse método consiste em determinar o Hamiltoniano procurado via operador de simetrias S do cristal. Sabe-se que, se tal comuta com H , então

$$D^\psi(S) \cdot H(\mathbf{k}) \cdot D^\psi(S^{-1}) = H(D^{\mathbf{k}}(S)\mathbf{k}), \quad (2.94)$$

sendo D^ψ a representação do operador de S na base ψ . O pacote QSYMM tomará, nesse caso, a representação matricial do operador S_4 (vide eq. (2.92)), juntamente com os operadores de simetria temporal e o de *Bulk Inversion Asymmetry* (BIA). Sendo assim, até a ordem quadrática de k , obtêm-se que

$$H_{BHZ} = \begin{pmatrix} M - B & Ak_- & \beta_1 k_- & \Delta \\ Ak_+ & -M + B & \Delta & \beta_2 k_- \\ \beta_1 k_+ & \Delta & M - B & Ak_+ \\ \Delta & \beta_2 k_+ & Ak_- & -M + B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C + D & 0 & 0 & F \\ 0 & C - D & F & 0 \\ 0 & F & C + D & 0 \\ F & 0 & 0 & C - D \end{pmatrix} k^2, \quad (2.95)$$

sendo A, B, C, D e M constantes e Δ e F referentes ao acoplamento BIA que, considerando a aproximação de simetria de inversão, pode ser desconsiderado. Na seção a seguir, o Hamiltoniano do BHZ, desconsiderando essas simetrias e o SOI, será apresentado formalmente, mas, valores tipicamente utilizados para as constantes do Hamiltoniano de um sistema baseado em poços quânticos de CdTe/HgTe são: $A = 364,5 \text{ meV nm}$, $B = -686 \text{ meV nm}^2$, $C = 0$, $D = -512 \text{ meV nm}^2$ e $M = -10 \text{ meV}$ (LIN et al., 2021).

3 Resultados

Nesta seção, aplicaremos toda a discussão teórica, discutida nos capítulos anteriores, para obter os resultados das oscilações de SdH em diferentes sistemas, sendo dois deles baseados em 2DEGs e um em TI, via modelo BHZ, analisando as frequências e padrões dessas oscilações. Também iremos discutir como a topologia dos materiais influenciam no efeito de SdH e, em especial, como o parâmetro de massa M do BHZ varia as oscilações na magneto-resistência.

3.1 Poços de GaAs

Considere o Hamiltoniano do modelo efetivo para um 2DEG de uma única sub-banda, dado pela soma do termo parabólico, relativo ao efeito Zeeman, com os termos de Rashba, Dresselhaus linear e Dresselhaus cúbico, respectivamente, na forma

$$H_{2D} = H_0 + H_Z + H_R + H_D^1 + H_D^3, \quad (3.1)$$

tais que

$$H_0 = \frac{\hbar}{2m^*} k^2 \sigma_0, \quad (3.2)$$

$$H_Z = \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z, \quad (3.3)$$

$$H_R = \alpha (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x), \quad (3.4)$$

$$H_D^1 = \beta_1 (k_x \sigma_x - k_y \sigma_y), \quad (3.5)$$

$$H_D^3 = 2\beta_3 \frac{k_x^2 - k_y^2}{k^2} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y), \quad (3.6)$$

com $\beta_3 = \gamma_D k^2/4$, sendo γ_D o parâmetro de acoplamento intra-sub-banda de Dresselhaus, os quais valores encontram-se em ([ASSIS; RAIMONDI; FERREIRA, 2021](#)).

Para o arseneto de gálio (GaAs), com parâmetros $m^* = 0,067m_0$, $g = -0,44$ (fator giromagnético) e $\gamma_D = 11 \text{ meV}\cdot\text{nm}^3$, consideramos dois casos separados para análise: um com baixo valor de Rashba SOC, $\alpha = 0,32 \text{ meV}\cdot\text{nm}$, e um com alto valor, $\alpha = 1 \text{ meV}\cdot\text{nm}$, ambos com $\beta_1 = 0,26 \text{ meV}\cdot\text{nm}$ e densidade $n_{2D} \approx 1,934 \cdot 10^{-4} \text{ nm}^{-2}$ em $B = 1 \text{ T}$ fixos. Os cálculos também consideram valores de alargamentos da DOS diferentes: para os estados localizados, $\hbar\tau^{-1} = 0,1 \text{ meV}$, e, para os estados estendidos (reduzido), um valor de $\hbar\tau^{-1} = 0,05 \text{ meV}$. Isso se deve ao fato do que já foi discutido na seção anterior, sobre quais alargamentos da DOS, estendidos ou localizados, contribuem para o cálculo das oscilações de SdH.

Primeiramente, calculamos o espectro de energia em função do campo magnético ($0 < B \leq 1$ T), o denominado Landau *fan*. Concomitantemente, obtemos a DOS via eq. (2.66) em função de B , e também a DOS normalizada, isto é, similar à da eq. (2.84), mas agora para um valor de campo mínimo, $\approx 1/200$, e em função de B^{-1} , para que os picos de oscilação tenham período igualmente espaçados, como se espera no modelo teórico de LK (vide eq. (2.68)). É a partir desse último método de análise, via inverso de B , que retiramos as frequências das oscilações de SdH.

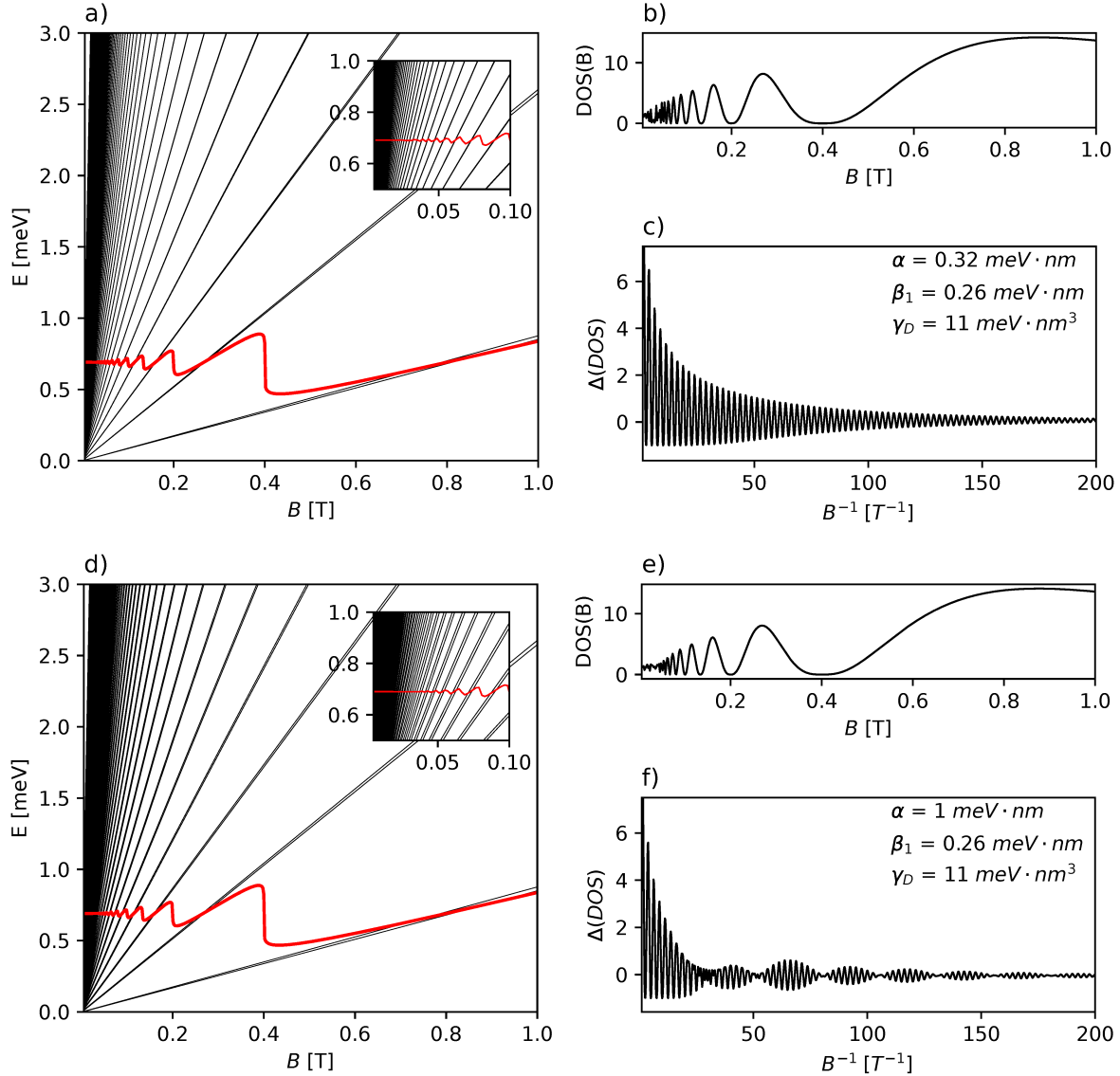


Figura 9 – (a) Landau *fan* para o GaAs com 100 LLs. Em vermelho, a energia de Fermi cruzando os níveis de energia; (b) DOS e (c) oscilações de SdH, todos no regime de baixo acoplamento SOC tipo Rashba. Idem para (d), (e) e (f), porém no regime de alto acoplamento Rashba SOC. Perceba que quanto maior o valor de α , maior é a presença de batimentos nas oscilações de SdH, vide (f). Fonte: os autores.

A partir dos dados ilustrados nas Figuras 9 (c) e (f), foi possível realizar uma

transformada de Fourier (FT) e obter o espectro das frequências. A Fig. 10 apresenta tais dados: note que, para o regime de baixo acoplamento SOC tipo Rashba (a), os picos de frequência F [T] são bem definidos, enquanto que para o regime de maior acoplamento (b), a aparição de batimentos é evidenciada pelos picos duplos e muito próximos.

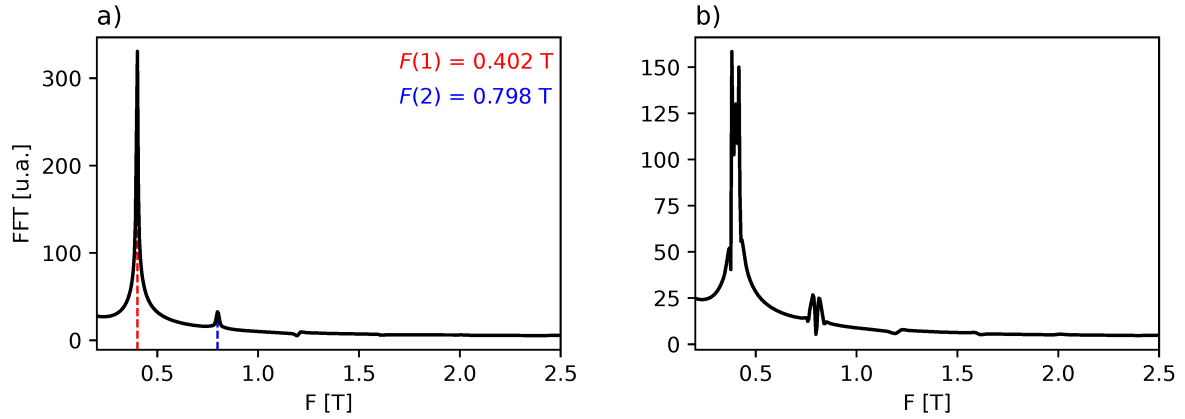


Figura 10 – (a) Transformadas de Fourier das oscilações de SdH no regime de baixo acoplamento SOC tipo Rashba e (b) para o regime de alta interação, em que a presença de batimentos é evidenciada pela aparição de picos de frequência duplos e próximos. Fonte: os autores.

Ainda no regime de baixo SOC, é possível realizar uma análise para extrair a fase de Berry do material, e, concomitantemente, a frequência do primeiro harmônico a partir da relação linear que os índices mínimos da oscilação de SdH da Fig. 9 (c) possuem com o inverso do campo magnético. Essa análise é, também, realizada em (ANDO, 2013), e os resultados aqui reproduzidos na Fig. 11 estão em concordância com os da literatura para o GaAs. Os resultados desta figura são retirados a partir da equação de LK, mais especificadamente do termo oscilatório proporcional ao cosseno, a qual relação é extraída na eq. (2.79).

A partir da linearização dos pares (N, B^{-1}) , lembrando que N corresponde ao índice dos mínimos nas oscilações de SdH (vide eq. (2.78)), pelo modelo teórico de LK, o coeficiente angular a nos retorna o inverso da frequência do primeiro harmônico, haja vista que estamos apenas interessados nos N do regime em que $B \rightarrow 0$, enquanto que o coeficiente linear b nos retorna a fase de Berry multiplicada pelo fator 2π , como é esperado pela eq. (2.80). A partir desses coeficientes, por LK, retiramos que a frequência $F_1 = 1/a \approx 0,4$ T (pela FT na Fig. 10 (a) o valor encontrado foi de 0,402 T) e fase de Berry $\gamma = [b/2\pi] \bmod 1 \approx 0$, como se é esperado para materiais com bandas parabólicas. No regime de alto SOC, não é possível realizar a mesma análise devido aos batimentos, pois esses corroboram para a não linearidade de $N(B^{-1})$.

Ainda realizamos um estudo de como o parâmetro de acoplamento Rashba α , e o de acoplamento linear de Dresselhaus β_1 , interferem nos picos da FT das oscilações de SdH,

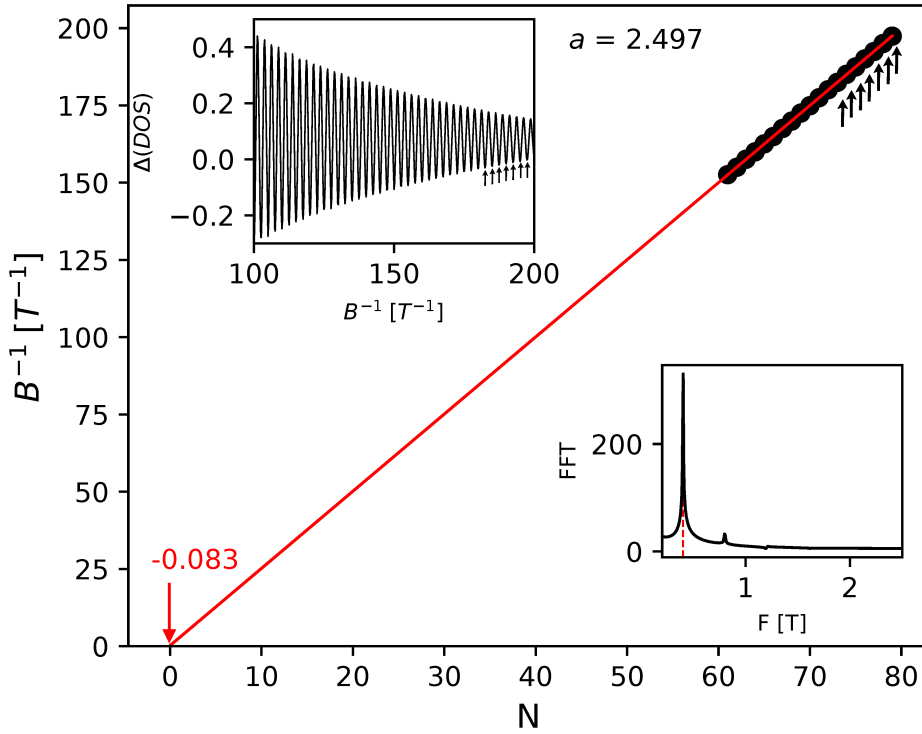


Figura 11 – Relação linear entre os mínimos das oscilações de SdH com o inverso de B para o regime de baixo acoplamento SOC via Rashba. O *inset* superior representa SdH, e as setas em preto nos gráficos representam as posições dos mínimos de oscilação, e o correspondente ponto de índice N . O coeficiente angular a da reta em vermelho, referente ao ajuste linear, retorna o valor da frequência de oscilação, explicitada no *inset* inferior pelo gráfico da FT. O valor de interseção da reta linearizada com o eixo em vermelho nos retorna o valor da fase de Berry, a menos de um mod 1. Fonte: os autores.

mantendo fixo o valor de β_3 para o GaAs. A análise revelou que, conforme aumentamos a interação do tipo Rashba, os harmônicos se dividem em mais picos, resultando em batimentos nas oscilações de SdH. Além disso, notamos que os harmônicos tendem a apresentar um valor máximo e único nos intervalos em que $\alpha \approx \beta_1$, o que aumenta, significativamente, o poder de resolução dos picos, reduzindo, assim, ruídos, e eliminando a presença de batimentos. Isso sugere que há uma condição ideal de equilíbrio entre α e β_1 que maximiza a nitidez dos picos na FT. Ambas as análises estão ilustradas na Fig. 12, onde são representados os resultados para os dois casos de interação SOI tipo Rashba. A faixa de espectro das constantes de SOI tipo Dresselhaus analisadas foi no intervalo de $[0, 4]$ meV·nm.

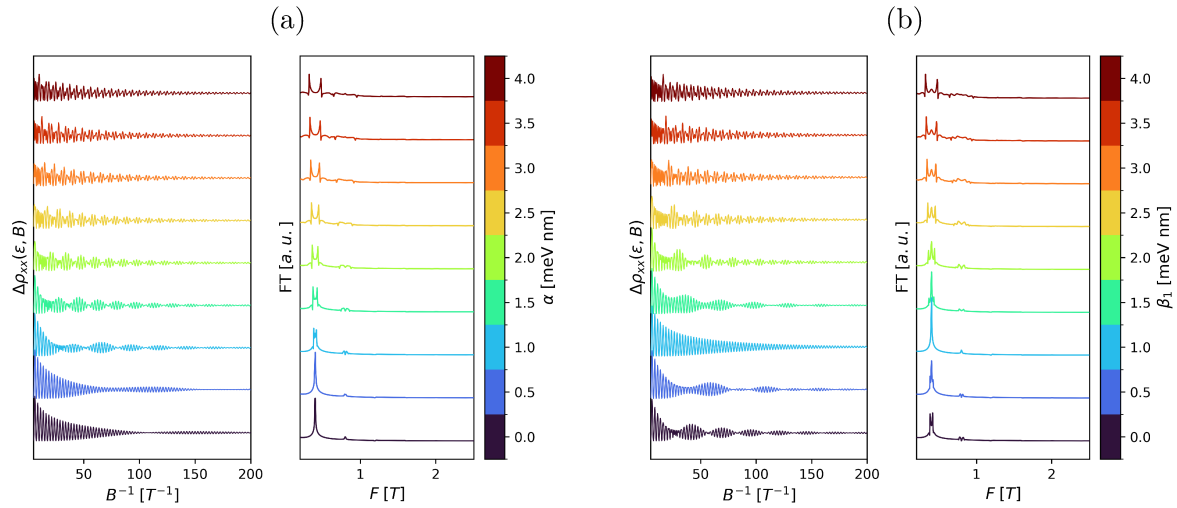


Figura 12 – Oscilações de SdH e as respectivas transformadas de Fourier em função dos parâmetros de SOI. A barra de cor nos gráficos representa a intensidade da interação α e β_1 , respectivamente. Em (a), temos o regime da interação Rashba variando, com β_1 fixado em 0.32 meV nm, enquanto que em (b), encontra-se o regime de variação do acoplamento Dresselhaus, com α fixado em 1.0 meV nm. Note que, em ambos os casos, o pico do primeiro harmônico possui uma tendência a se manter único (sem batimentos) quanto $\alpha \approx \beta_1$. É perceptível, também, que quanto maior é o SOI, em mais picos os harmônicos se dividem, dando surgimento aos batimentos. Fonte: os autores.

3.2 Poços de InSb

Feito esse primeiro estudo de SdH para o GaAs, partiremos para o antimoneto de índio (InSb), outro semiconductor que possui alta mobilidade eletrônica, utilizado em vários dispositivos optoeletrônicos. O propósito de refazermos essa análise para o InSb é o de reproduzir os dados de (CANDIDO et al., 2023), mais especificadamente a figura 12 desse artigo, que calcula uma aproximação numérica para a FT nesse material conforme se variam os parâmetros de Rashba e Dresselhaus, sendo esse último, agora, uma combinação linear das contribuições linear e cúbica. Os autores propõem, analiticamente, uma condição para a ausência de batimentos induzidos pelos SOC α e β para qualquer harmônico, dada quando a razão entre eles segue a seguinte relação

$$\frac{\alpha}{\beta} = \sqrt{\frac{1 - \tilde{\Delta}}{1 + \tilde{\Delta}}}, \quad (3.7)$$

em que $\tilde{\Delta}$ é um parâmetro do material dado pela razão entre o Zeeman *splitting* e o espaçamento dos LLs, que pode ser calculado por $\tilde{\Delta} = g^*m^*/2m_0$. Note que essa razão difere dos resultados para quando $\alpha = \beta$, pois, nesse caso, têm-se o *persistent spin helix* (PSH) (CANDIDO et al., 2023), fenômeno em que SOI é balanceado, de forma que os spins dos elétrons formam uma textura helicoidal protegida contra desordem. Em SdH, o PSH afeta as oscilações ao modificar as amplitudes e fases, refletindo a interação entre o

transporte eletrônico e a textura de spin nos materiais. Para o InSb, é observado que, no regime do PSH, surge um batimento no segundo harmônico das oscilações de SdH.

Sobre os dados do sistema, a densidade eletrônica utilizada para os cálculos foi $n_{2D} = 3,3 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^{-2}$, e o alargamento da DOS igual a $\hbar\tau^{-1} = 1,75 \text{ meV}$, sendo o reduzido igual a $0,75 \text{ meV}$. O InSb possui $m^* = 0,019m_0$ e $g = -34$. Para 100 LLs, o Landau *fan*, a DOS e as oscilações de SdH se encontram na Fig. (a), (b) e (c), respectivamente. Utilizamos os parâmetros de SOI para o regime de ausência de batimentos ($\alpha = 7 \text{ meV nm}$ e $\beta = 5 \text{ meV nm}$). De forma análoga, calculamos a FT para SdH desse caso, como ilustra a Fig. 14.

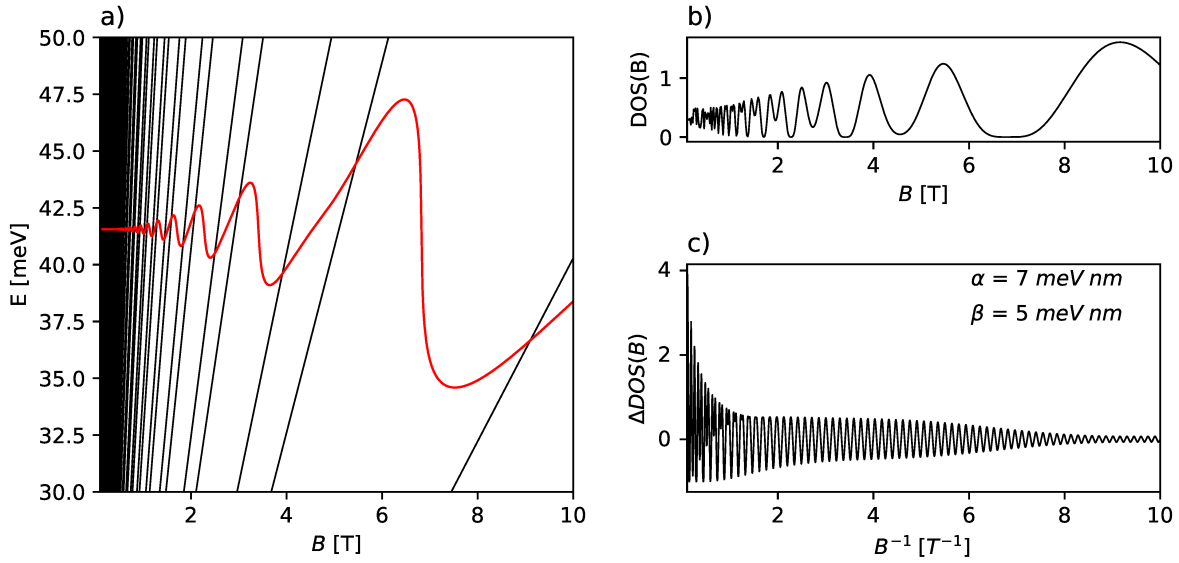


Figura 13 – (a) Landau *fan* para o InSb com 100 LLs. Em vermelho, a energia de Fermi cruzando os níveis; (b) DOS e (c) oscilações de SdH em função da DOS reduzida (referente ao cálculo dos estados localizados). Os valores para as SOI α e β se encontram em (c), e seguem o regime da eq. (3.7). Fonte: os autores.

Utilizando o mesmo método para cálculo de FT, variamos os parâmetros de SOC de 0 a 9 meV nm, mas, agora, considerando a densidade constante, e não o potencial químico. Logo, obtivemos os seguintes resultados, como ilustra a Fig. 15. Comparando os nossos resultados com os obtidos por (CANDIDO et al., 2023) (vide figura 12 no artigo original), observamos uma congruência significativa entre eles. Essa consistência evidencia a boa performance e a precisão do código implementado nesse trabalho, efetivando sua acurácia na reprodução dos resultados esperados.

3.3 Poços de HgTe/CdTe

Como visto na seção sobre a dedução do modelo BHZ via simetrias, neste parte final de resultados, apresentar-se-á os dados de SdH para a hetero-estrutura CdTe/HgTe/CdTe.

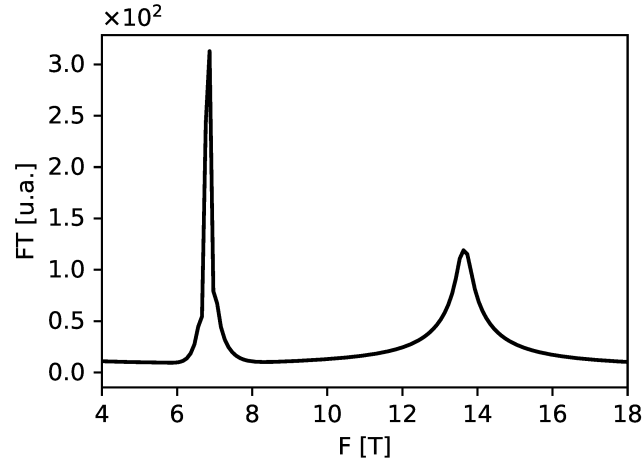


Figura 14 – FT das oscilações de SdH para o InSb no regime de ausência de batimentos induzidos por SOC. Fonte: os autores.

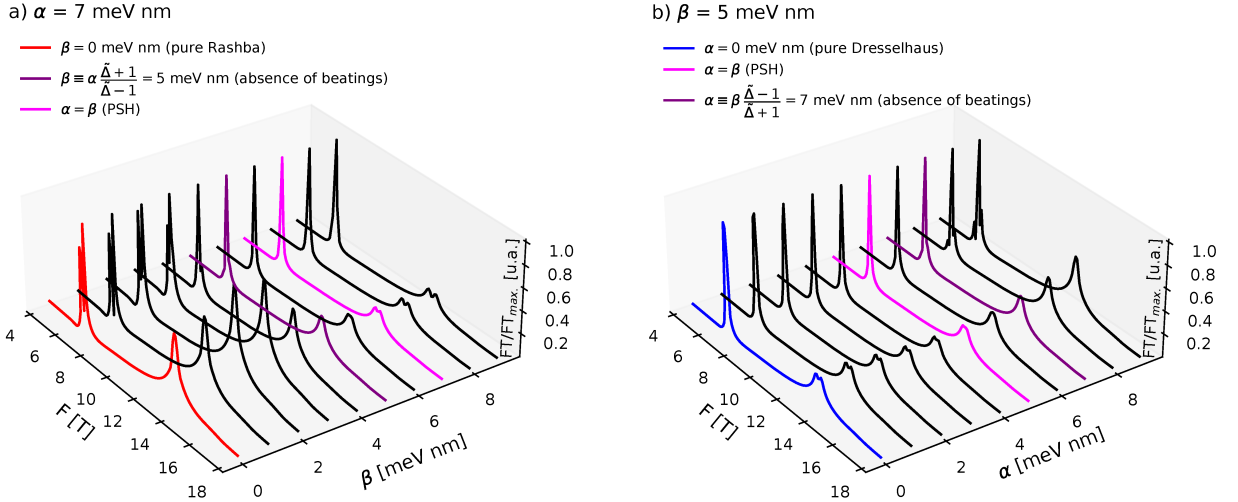


Figura 15 – (a) FT de SdH conforme variação do parâmetro Dresselhaus, fixado $\alpha = 7$ meV nm, e (b) idem para o parâmetro Rashba, fixado $\beta = 5$ meV nm. As curvas correspondentes a $\alpha/\beta = \sqrt{(1 - \tilde{\Delta})/(1 + \tilde{\Delta})}$ são mostradas em roxo (ausência de batimentos), e aquelas para $\alpha = \beta$ são mostradas em rosa (PSH). A curva vermelha em (a) representa o sistema com puro SOI tipo Rashba ($\beta = 0$), enquanto que a curva azul em (b) representa o sistema com puro SOI tipo Dresselhaus ($\alpha = 0$). Fonte: os autores.

Consideremos o Hamiltoniano puro, dado pela equação (3.8), sem quebra de simetrias, BIA e acoplamentos SOI, com o fito de estudar, a priori, como é a dinâmica eletrônica nesse material submetido a um campo magnético.

$$H_{BHZ}^0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} + M(\mathbf{k}) & Ak_- & 0 & 0 \\ Ak_+ & \varepsilon_{\mathbf{k}} - M(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} + M(\mathbf{k}) & -Ak_+ \\ 0 & 0 & -Ak_- & \varepsilon_{\mathbf{k}} - M(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Do Hamiltoniano acima, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = C - Dk^2$, $M(\mathbf{k}) = M - Bk^2$ e $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ com parâmetros para o poço quântico de HgTe/CdTe iguais a $A = 364,5$ meV nm, $B = -686$ meV nm², $C = 0$, $D = -512$ meV nm² e $M = -10$ meV. Para essa análise, foi considerada uma densidade eletrônica de $n_{2D} \approx 1,934 \cdot 10^{-4}$ nm⁻², com o alargamento da DOS igual a $\hbar\tau^{-1} = 0,08$ meV para os estados localizados, e $\hbar\tau^{-1} = 0,05$ meV para os estados estendidos. Com isso, o digrama de Landau obtido, assim como a oscilações de SdH pela DOS, encontram-se na Fig. 16.

A partir da DOS normalizada, é possível retirar o valor das frequências que compõem essa oscilação. No caso, foram obtidos dois picos referentes a dois harmônicos, como ilustra o gráfico da FT na Fig. 17.

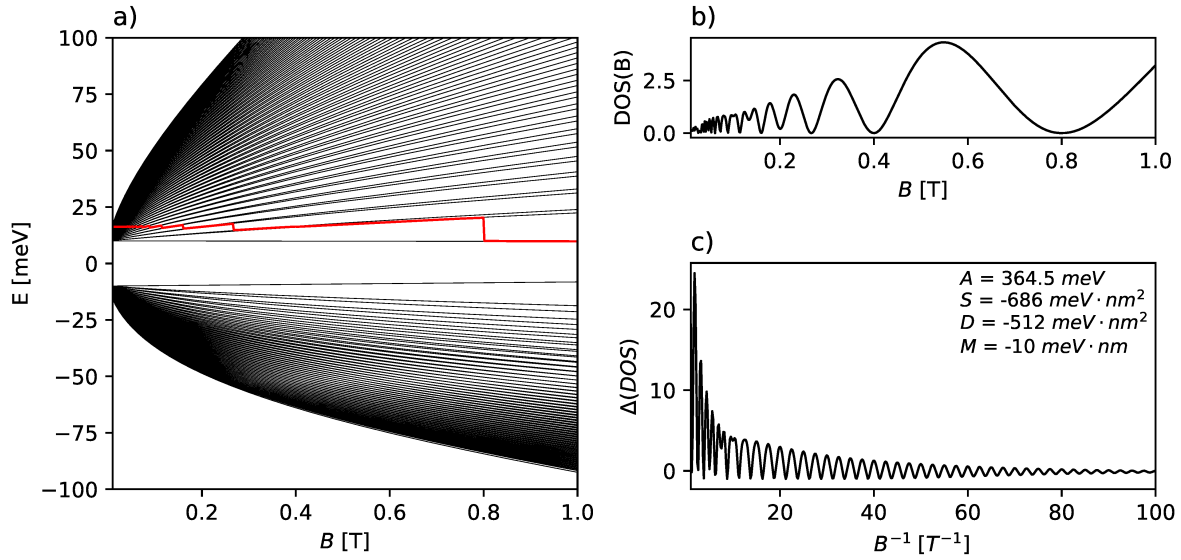


Figura 16 – (a) Landau *fan* para o HgTe/CdTe com 50 LLs. Em vermelho, a energia de Fermi cruzando os níveis; (b) DOS e (c) oscilações de SdH em função da DOS reduzida. Fonte: os autores.

Também foi possível realizar a análise de como os mínimos das oscilações se encontram linearmente distribuídos com o inverso do campo. Já que a FT retornou duas frequências próximas, e ambas com amplitudes relevantes, têm-se duas distribuições lineares, uma para cada harmônico, como ilustra a Fig. 18. Comparando os valores das retas obtidas com o gráfico da FT, e, utilizando a relação da equação de LK, dado por (2.79) e (2.80), retira-se que as frequências são $F_1 = 1/a_1 \approx 0,8$ T e $F_2 = 1/a_2 = 0,4$ T, o que concorda muito bem com os dados retirados na FT. SdH se baseia nas oscilações em baixo campo, logo, retira-se o valor da fase de Berry para o harmônico com maior amplitude, que, nesse caso, é o primeiro. A origem do segundo harmônico reside na degenerescência das energias de spin *up* e *down*, dos blocos do Hamiltoniano, para valores de baixo e alto campo magnético. Fazendo $\gamma = [b_2/2\pi] \bmod 1 = 1/2$, retorna-se que a fase de Berry está de acordo com o esperado para materiais com bandas lineares (tipo Dirac).

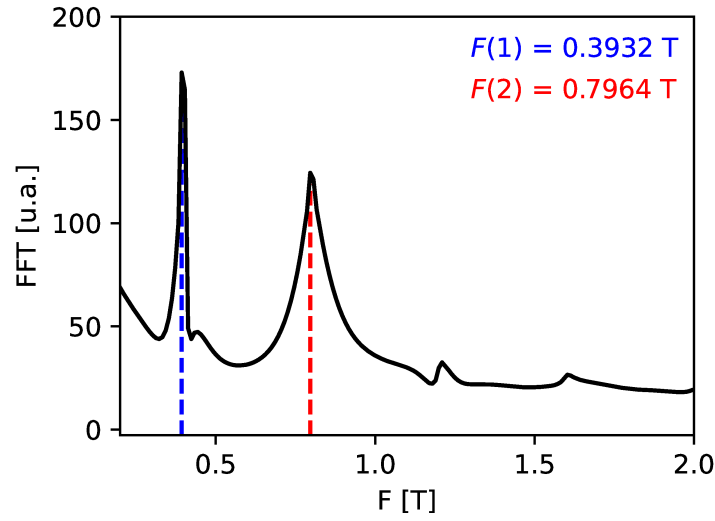


Figura 17 – FT das oscilações na DOS em HgTe/CdTe. Os harmônicos possuem picos em aproximadamente 0,4 e 0,8 T. Fonte: os autores.

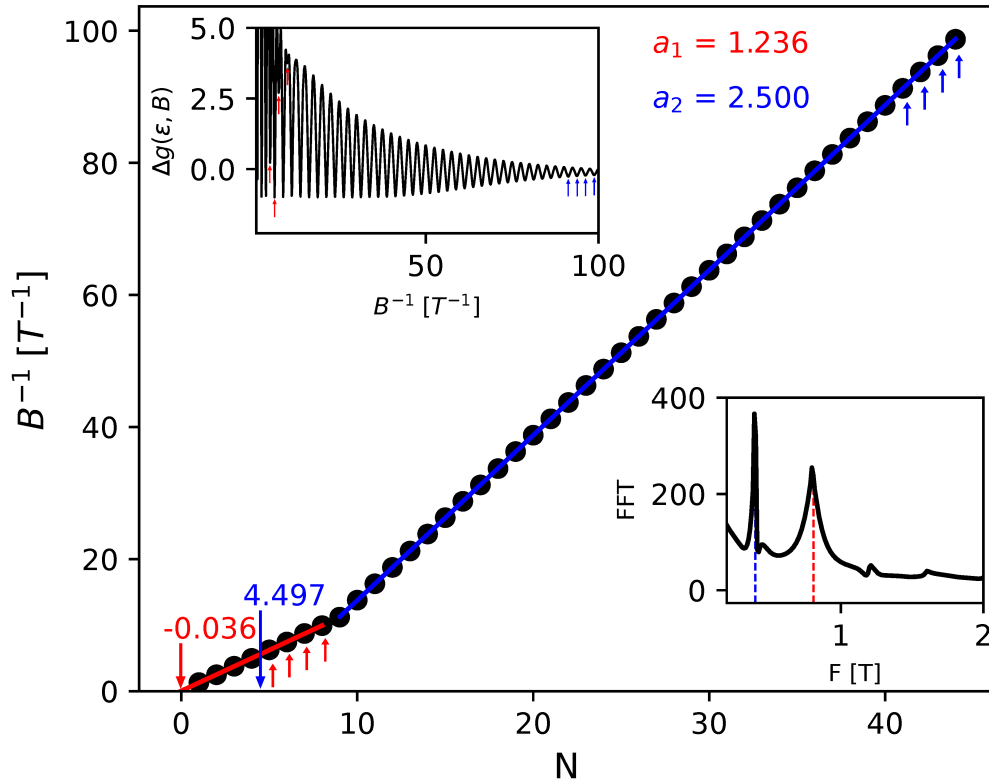


Figura 18 – Relação linear entre os mínimos das oscilações de SdH com o inverso de B . A existência de duas retas está relacionada ao fato da presença de dois harmônicos no sinal. As linearizações apresentam o local em que as retas cortam o eixo das ordenadas, b_1 e b_2 , assim como os coeficientes angulares dessas retas, a_1 e a_2 . Fonte: os autores.

Por fim, um dos resultados mais interessantes foi estudar como SdH se comporta conforme o parâmetro de massa M do Hamiltoniano da eq. (3.8) varia. Para isso, limitamos uma faixa de M em $[-25, 10]$ meV e calculamos SdH para cada valor dentro desse intervalo.

O resultado é apresentado nos gráficos em 2D e em 3D da Fig. 19. Note que, os picos que possuem uma linha tracejada, vão se dividindo em dois conforme o valor de M aumenta. Isso indica que o material passa a apresentar um desvio nos mínimos das oscilações de SdH em função do inverso do campo, dado a evolução do parâmetro de massa. Conforme M aumenta, o material passa do estado topológico para o trivial, ou seja, as oscilações para baixo valor de B passam a apresentar uma frequência, aproximadamente, duas vezes maior do regime de alto campo. Isso fica visível nos resultados obtidos na FT, em que a frequência do segundo pico é exatamente o dobro da primeira, e isso é caracterizado analisando o comportamento de SdH em função de M no Hamiltoniano.

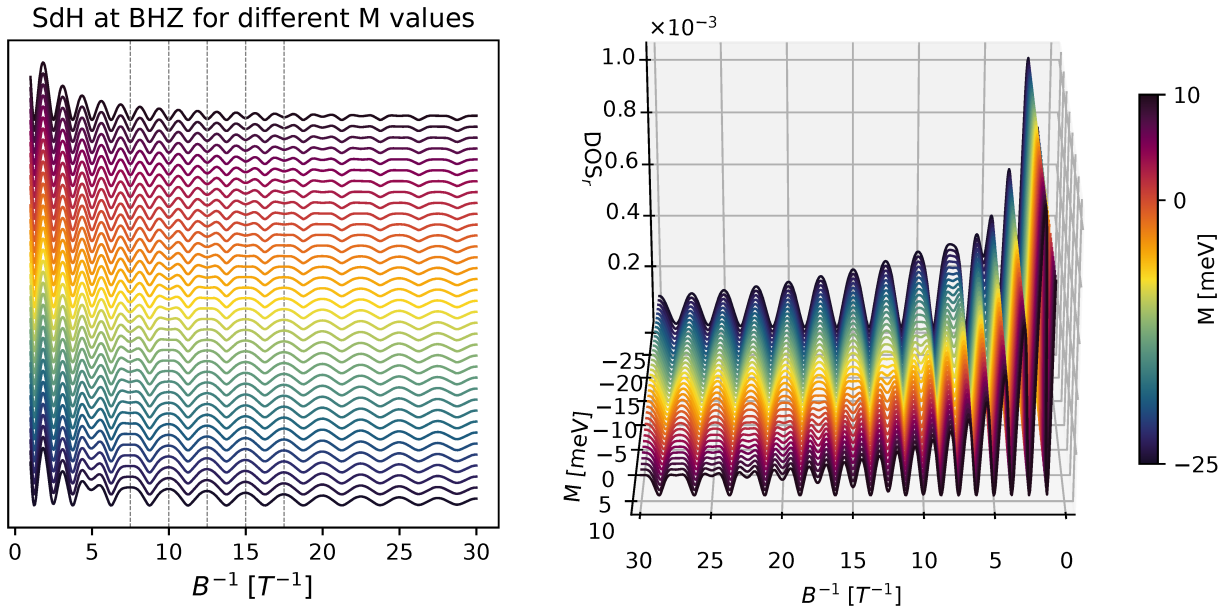


Figura 19 – Variação de SdH conforme o parâmetro de massa M do modelo BHZ. As linhas tracejadas no gráfico à esquerda indicam a mudança na fase de Berry, conforme o parâmetro de massa varia. Fonte: os autores.

4 Conclusões e Perspectivas

O objetivo principal desse trabalho era analisar e reproduzir os dados de SdH para alguns Hamiltonianos modelo (2DEGs e TIs), e, para isso, foi necessário um aprofundamento sobre as estruturas eletrônicas dessas classes de materiais, partindo da quantização de energia em níveis de Landau, até a aplicação dessa teoria no cálculo da DOS. Também foi de grande importância o estudo do modelo de Drude para cálculos de transporte eletrônico sobre os efeitos Hall, e de como a magneto-resistividade nesses podem ser relacionadas com a DOS utilizando a primeira aproximação de Born para taxa de espalhamento. Além disso, a compreensão dos modelos analíticos, como a equação de LK, ajudaram, por fim, a análise e a extração de dados, como as frequências e a fase de Berry. Além de cumprir os objetivos de reproduzir algumas informações da literatura e uma imagem da referência (CANDIDO *et al.*, 2023), reforçando a validade da análise numérica, também foi possível extrair resultados de como SdH varia de acordo com o parâmetro de massa do modelo BHZ, evidenciando a divisão de alguns picos de oscilação em dois, conforme o material passa do estado topológico para o trivial, realçando, assim, a transição da fase de Berry.

Todo esse trabalho terá continuidade em um futuro projeto de mestrado, em que novos métodos de análise serão levados em consideração para calcular SdH. Um exemplo disso será utilizar a fórmula de Kubo (KUBO, 1957) para obter a resistividade Hall, ao invés de usar Drude e Born, o que envolverá uma matemática mais sofisticada utilizando funções de Green. Além disso, vários são os materiais que possuem altos valores de magneto-resistividade, inclusive para campos magnéticos extraordinariamente intensos, na ordem de 60 T. O projeto, em si, possui uma vasta área de aplicabilidades na indústria de materiais, as quais podem aprofundar e enriquecer os conhecimentos sobre SdH.

Referências

- ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 54, p. 437–672, Apr 1982. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.54.437>>. Citado na página 36.
- ANDO, T.; UEMURA, Y. Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields. i. characteristics of level broadening and transport under strong fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, Physical Society of Japan, v. 36, n. 4, p. 959–967, abr. 1974. ISSN 1347-4073. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.36.959>>. Citado na página 40.
- ANDO, Y. Topological insulator materials. *Journal of the Physical Society of Japan*, Physical Society of Japan, v. 82, n. 10, p. 102001, out. 2013. ISSN 1347-4073. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.102001>>. Citado 3 vezes nas páginas 37, 39 e 47.
- ANIRBAN, A. 15 years of topological insulators. *Nature Reviews Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 5, p. 267–267, maio 2023. ISSN 2522-5820. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/s42254-023-00587-y>>. Citado na página 15.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. *Solid State Physics*. Florence, KY: Brooks/Cole, 1976. Citado na página 16.
- ASSIS, I. R. de; RAIMONDI, R.; FERREIRA, G. J. Spin drift-diffusion for two-subband quantum wells. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 103, p. 165304, Apr 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.165304>>. Citado na página 45.
- BARGE, C. Y. Delocalization by disorder in gaas/algaas heterostructures. University of Basel, 2012. Disponível em: <<https://edoc.unibas.ch/18997/>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 40.
- BERNEVIG, B. A. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2013. Citado na página 16.
- 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. ISSN 1095-9203. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1126/science.1133734>>. Citado 3 vezes nas páginas 18, 41 e 42.
- BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 17, n. 33, p. 6039–6045, nov. 1984. ISSN 0022-3719. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/17/33/015>>. Citado na página 16.
- CANDIDO, D. R. et al. Beating-free quantum oscillations in two-dimensional electron gases with strong spin-orbit and zeeman interactions. *Phys. Rev.*

- Res., American Physical Society, v. 5, p. 043297, Dec 2023. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.5.043297>. Citado 4 vezes nas páginas 19, 49, 50 e 55.
- FERREIRA, G. J. *Ferromagnetismo no regime Hall quântico inteiro via teoria do funcional de densidade*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, Agência USP de Gestão da Informação Acadêmica (AGUIA), 2011. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.11606/T.76.2011.tde-31082011-100156>. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 40.
- FERREIRA, G. J. et al. Engineering topological phases in triple hgte/cdte quantum wells. *Scientific Reports*, Springer Science and Business Media LLC, v. 12, n. 1, fev. 2022. ISSN 2045-2322. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-022-06431-0>. Citado na página 37.
- FRENCH, A. P.; TAYLOR, E. F. *Introduction to Quantum Physics*. New York, NY: WW Norton, 1978. Citado na página 21.
- GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3. ed. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2018. Citado na página 23.
- GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 6, p. 063065, jun. 2014. ISSN 1367-2630. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063065>. Citado na página 19.
- HAAS, W. J. de; ALPHEN, P. M. van. The dependence of the susceptibility of diamagnetic metals upon the field. *Proc. Akad. Wet. Amsterdam*, v. 33, p. 1106–1118, 1930. ISSN 0370-0348. Citado na página 15.
- HALDANE, F. D. M. $O(3)$ nonlinear σ model and the topological distinction between integer- and half-integer-spin antiferromagnets in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, p. 1029–1032, Aug 1988. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.1029>. Citado na página 17.
- HATSUGAI, Y. Chern number and edge states in the integer quantum hall effect. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 71, n. 22, p. 3697–3700, nov. 1993. ISSN 0031-9007. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.3697>. Citado na página 18.
- HE, Q. L. et al. Topological spintronics and magnetoelectronics. *Nature Materials*, Springer Science and Business Media LLC, v. 21, n. 1, p. 15–23, dez. 2021. ISSN 1476-4660. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1038/s41563-021-01138-5>. Citado na página 15.
- KANE, C. L.; MELE, E. J. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 95, n. 22, nov. 2005. ISSN 1079-7114. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801>. Citado na página 17.
- KIM, S. K. et al. Realization of the haldane-kane-mele model in a system of localized spins. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 117, n. 22, nov. 2016. ISSN 1079-7114. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.227201>. Citado na página 17.

KLITZING, K. von. The quantized hall effect. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 58, n. 3, p. 519–531, jul. 1986. ISSN 0034-6861. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.58.519>>. Citado 3 vezes nas páginas 16, 32 e 33.

KOSTER, G. Space groups and their representations. In: _____. *Solid State Physics*. Elsevier, 1957. p. 173–256. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60103-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60103-4)>. Citado na página 43.

KUBO, R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, Physical Society of Japan, v. 12, n. 6, p. 570–586, jun. 1957. ISSN 1347-4073. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>>. Citado na página 55.

LANDAU, L. Diamagnetismus der metalle. *Zeitschrift für Physik*, Springer Science and Business Media LLC, v. 64, n. 9–10, p. 629–637, set. 1930. ISSN 1434-601X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01397213>>. Citado na página 15.

LI, L. et al. Quantum oscillations in a two-dimensional electron gas in black phosphorus thin films. *Nature Nanotechnology*, Springer Science and Business Media LLC, v. 10, n. 7, p. 608–613, maio 2015. ISSN 1748-3395. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2015.91>>. Citado na página 15.

LIFSHITS, E.; KOSEVICH, A. Theory of the shubnikov—de haas effect. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, v. 4, n. 1, p. 1–10, 1958. ISSN 0022-3697. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369758901896>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 30.

LIN, L. et al. Spin–flip manipulation in hgte/cdte heterostructure interface states with rashba and dresselhuas spin–orbit interactions. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 125, p. 114427, 2021. ISSN 1386-9477. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947720307244>>. Citado na página 44.

POLYAKOV, A. Fermi-surface investigations of rare-earth transition-metal compounds. 2012. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:99850337>>. Citado na página 30.

PRANGE, R. E. Quantized hall resistance and the measurement of the fine-structure constant. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 23, p. 4802–4805, May 1981. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.4802>>. Citado na página 35.

PULIZZI, F. Spintronics. *Nature Materials*, Springer Science and Business Media LLC, v. 11, n. 5, p. 367–367, abr. 2012. ISSN 1476-4660. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nmat3327>>. Citado na página 15.

RASHBA, E. I. Spin–orbit coupling goes global. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 28, n. 42, p. 421004, ago. 2016. ISSN 1361-648X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/28/42/421004>>. Citado na página 16.

ROTHER, D. G. et al. Fingerprint of different spin–orbit terms for spin transport in hgte quantum wells. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 065012, jun. 2010. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/12/6/065012>>. Citado na página 43.

SCHREIBER, K. A. The quantum hall effect. In: _____. *Springer Theses*. Springer International Publishing, 2019. p. 1–24. ISBN 9783030263225. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-26322-5_1>. Citado na página 36.

SCHUBNIKOW, L.; HAAS, W. J. D. A new phenomenon in the change of resistance in a magnetic field of single crystals of bismuth. *Nature*, Springer Science and Business Media LLC, v. 126, n. 3179, p. 500–500, out. 1930. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/126500a0>>. Citado na página 15.

SHEN, S.-Q. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer Berlin Heidelberg, 2012. ISSN 0171-1873. ISBN 9783642328589. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-32858-9>>. Citado na página 16.

STEIN, D.; KLITZING, K. v.; WEIMANN, G. Electron spin resonance on GaAs – $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x$ As heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 51, p. 130–133, Jul 1983. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.51.130>>. Citado na página 15.

STORMER, H. L. et al. Energy structure and quantized hall effect of two-dimensional holes. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 51, p. 126–129, Jul 1983. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.51.126>>. Citado na página 15.

THOULESS, D. J. et al. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 49, n. 6, p. 405–408, ago. 1982. ISSN 0031-9007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405>>. Citado na página 17.

TONG, D. *Lectures on the Quantum Hall Effect*. arXiv, 2016. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1606.06687>>. Citado 3 vezes nas páginas 28, 31 e 35.

VARJAS, D.; ROSDAHL, T. O.; AKHMEROV, A. R. Qsymm: algorithmic symmetry finding and symmetric hamiltonian generation. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 20, n. 9, p. 093026, set. 2018. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/aadf67>>. Citado na página 43.

WINKLER, R. *Spin–Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer Berlin Heidelberg, 2003. ISSN 1615-0430. ISBN 9783540366164. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/b13586>>. Citado na página 41.

ZETTILI, N. *Quantum mechanics*. 3. ed. Nashville, TN: John Wiley & Sons, 2022. Citado na página 23.

ZHANG, G. et al. Graphene-based spintronics. *Applied Physics Reviews*, AIP Publishing, v. 11, n. 2, abr. 2024. ISSN 1931-9401. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/5.0191362>>. Citado na página 15.

ZHAO, W.; WANG, X. Berry phase in quantum oscillations of topological materials. *Advances in Physics: X*, Taylor & Francis, v. 7, n. 1, p. 2064230, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/23746149.2022.2064230>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 38.

Apêndices

APÊNDICE A – Sistemas bidimensionais de elétrons com duas sub-bandas

Nesta seção, focaremos em apresentar os resultados preliminares que obtivemos no início desse projeto de pesquisa. Tais, residem no estudo de SdH em 2DEGs, considerando o cSOC de duas sub-bandas. São realizados, a seguir, os cálculos do início do projeto para determinação das relações de energia dos LLs, com e sem SOC, ou seja, a título de curiosidade, como é obtido o Hamiltoniano dessa configuração de forma analítica. Em seguida, finalizamos a análise implementando o modelo no Kwant, para obter o espectro de energias e, conseqüentemente, calcular as resistividades do IQHE. Logo, podemos generalizar o Hamiltoniano que descreve essa configuração, entre duas sub-bandas $j = \{1, 2\}$, com uma diferença de energia $\Delta_\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$, como

$$H_j^0 = \varepsilon_j + \frac{\pi^2}{2m} + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z, \quad (\text{A.1})$$

que, com os operadores de levantamento e abaixamento já definidos anteriormente, pode ser reescrito como

$$H_{j,n,\sigma_z}^0 = \varepsilon_j + \hbar\omega_c \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \xi \hbar\omega_c \sigma_z, \quad (\text{A.2})$$

em que $\xi = mg\mu_B/2e\hbar$ é o termo de Zeeman do Hamiltoniano e σ_z é a componente z do operador de spin. Definindo a base do sistema no espaço de Hilbert na forma $|j, n, \mathbf{R}, \sigma\rangle$, em que n são os LLs, $\mathbf{R}$ o raio do movimento e σ o spin em z , temos que as energias serão dadas por

$$E_{j,n,\sigma} = \varepsilon_j + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \xi \hbar\omega_c. \quad (\text{A.3})$$

Ao incluir, agora, o spin-órbita na matemática do modelo, é necessário considerar outros dois Hamiltonianos relacionados na descrição desse fenômeno: o de Rashba e o de Dresselhaus. A energia dos elétrons será influenciada pela interação de seus spins com o campo elétrico gerado pelos núcleos atômicos do material. Esses novos Hamiltonianos levam em conta os termos de spin-órbita relacionados a energia cinética adquirida pelos elétrons na presença do campo magnético, e tais são dados por

$$\hat{H}_j^R = \hbar\omega_c \alpha_j \begin{pmatrix} 0 & i\hat{a}^\dagger \\ -i\hat{a} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$\hat{H}_j^D = \hbar\omega_c \beta_j \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

em que $\alpha_j = \alpha_{0,j} \sqrt{2m/\hbar^3 \omega_c}$ e $\beta_j = \beta_{0,j} \sqrt{2m/\hbar^3 \omega_c}$ são constantes.

Juntando todos os Hamiltonianos dessa análise, teremos

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & \hat{H}_{12} \\ \hat{H}_{12}^\dagger & \hat{H}_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

onde a diagonal principal dessa matriz é a soma dos Hamiltonianos já discutidos, $\hat{H}_j = \hat{H}_{j,n,\sigma_z}^0 + \hat{H}_j^R + \hat{H}_j^D$. Os termos da anti-diagonal se referem ao acoplamento de energia entre as sub-bandas, dados pelo Hamiltoniano de mistura de bandas, definido por

$$\hat{H}_{12} = \hbar\omega_c\eta \begin{pmatrix} 0 & i\hat{a}^\dagger \\ -i\hat{a} & 0 \end{pmatrix} - \hbar\omega_c\Gamma \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

em que $\eta = \eta_{0,j} \sqrt{2m/\hbar^3 \omega_c}$ e $\Gamma = \Gamma_{0,j} \sqrt{2m/\hbar^3 \omega_c}$ são constantes.

$\hat{H}$ será uma matriz quadrada de dimensão 8×8 , no entanto, estamos interessados apenas no quadrante central, de dimensão 4×4 , que descreve o espectro de energias entre as sub-bandas $j = 1$ e $j = 2$, cada qual com spins *up* e *down*. Os termos da diagonal principal são dados pela eq. (A.3), enquanto que os da anti-diagonal são dados pela matriz que compões os termos de spin-órbita, somente. Portanto, o que estamos estudando é, de fato, a seguinte matriz de Hamiltonianos:

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \hat{H}_{1,1,\sigma_z}^0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_{2,0,\sigma_z}^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{H}_1^R + \hat{H}_1^D & \hat{H}_{12} \\ \hat{H}_{12}^\dagger & \hat{H}_2^R + \hat{H}_2^D \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

Logo, é preciso diagonalizar a segunda matriz que compõe $\hat{H}'$, referente ao SOC das bandas. Para isso, definimos os seguintes vetores em funções dos LLs na base $|j n \sigma\rangle$:

$$|1 1 \uparrow\rangle = \begin{pmatrix} |1\rangle \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1 1 \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |1\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2 0 \uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ |0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2 0 \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Queremos determinar as relações dessa base com os Hamiltonianos Rashba (eq. (A.4)), Dressenhaus (eq. (A.5)) e o de mistura de bandas (eq. (A.7)). Começamos com o de Rashba para $j = 1$ e spin *up*, tendo em vista as relações das eqs. (2.38):

$$\begin{aligned} \hat{H}_1^R |1 1 \uparrow\rangle &= \hbar\omega_c\alpha_1 \left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 0 & i\hat{a}^\dagger \\ -i\hat{a} & 0 \end{pmatrix} & \mathbb{O} \\ \hline \mathbb{O} & \mathbb{O} \end{array} \right) \begin{pmatrix} |1\rangle \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -i\hbar\omega_c\alpha_1 \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{a} |1\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= -i\hbar\omega_c\alpha_1 \sqrt{1} \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -i\hbar\omega_c\alpha_1 |1 0 \downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Com isso, conclui-se que o Hamiltoniano de Rashba, aplicado a um vetor $|1\ 1\ \uparrow\rangle$, tem um retorno proporcional ao vetor $|1\ 0\ \downarrow\rangle$, ou seja, a sub-banda se preserva e os LLs e spin se alteram. Generalizando,

$$\hat{H}_j^R |j\ n\ \uparrow\rangle = -i\hbar\omega_c\alpha_j\sqrt{n}\ |j\ (n-1)\ \downarrow\rangle, \quad (\text{A.11a})$$

$$\hat{H}_j^R |j\ n\ \downarrow\rangle = i\hbar\omega_c\alpha_j\sqrt{n+1}\ |j\ (n+1)\ \uparrow\rangle. \quad (\text{A.11b})$$

Realizando o procedimento para o Hamiltoniano de Dressenhaus, teremos

$$\hat{H}_j^D |j\ n\ \uparrow\rangle = i\hbar\omega_c\beta_j\sqrt{n+1}\ |j\ (n+1)\ \downarrow\rangle, \quad (\text{A.12a})$$

$$\hat{H}_j^D |j\ n\ \downarrow\rangle = -i\hbar\omega_c\beta_j\sqrt{n}\ |j\ (n-1)\ \uparrow\rangle. \quad (\text{A.12b})$$

Agora, para o Hamiltoniano de mistura de bandas, como o próprio nome sugere, j não se manterá o mesmo como nos cSOCs anteriores, então a aplicação retornará um valor proporcional a j' , isto é, se $j = 1 \implies j' = 2$, e vice-versa. Sendo assim, teremos

$$\hat{H}_{12} |j\ n\ \uparrow\rangle = -i\hbar\omega_c\eta\sqrt{n}\ |j'\ (n-1)\ \downarrow\rangle - i\hbar\omega_c\Gamma\sqrt{n+1}\ |j'\ (n+1)\ \downarrow\rangle, \quad (\text{A.13a})$$

$$\hat{H}_{12} |j\ n\ \downarrow\rangle = i\hbar\omega_c\eta\sqrt{n+1}\ |j'\ (n+1)\ \uparrow\rangle + i\hbar\omega_c\Gamma\sqrt{n}\ |j'\ (n-1)\ \uparrow\rangle. \quad (\text{A.13b})$$

Finalmente, podemos montar a matriz do Hamiltoniano da eq. (A.8) com os elementos de matrizes calculados acima. Então,

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \lambda_{11\uparrow} & 0 & 0 & i\hbar\omega_c\eta \\ 0 & \lambda_{11\downarrow} & -i\hbar\omega_c\Gamma & 0 \\ 0 & i\hbar\omega_c\Gamma & \lambda_{20\uparrow} & 0 \\ -i\hbar\omega_c\eta & 0 & 0 & \lambda_{20\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

em que $\lambda_{j\ n\ \sigma_z} = \varepsilon_j + \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \sigma_z\xi\hbar\omega_c$, proveniente da eq. (A.2). A diagonalização dessa matriz nos retornará os LLs das sub-bandas $j = 1$ e $j = 2$, como ilustra os gráficos da Fig. 20.

Sem SOC, Fig. 20 (a), as energias são lineares em $\hbar\omega_c$, ou seja, proporcionais ao campo magnético, e, além disso, os cruzamentos entre spins iguais, ou opostos, é preservado. Já com SOC, Fig. 20 (b), as energias para $\sigma_z = -\sigma'_z$ sofrem um anti-cruzamento devido os SOC inter-sub-banda η e Γ , que estão indicados pelas setas no gráfico, o que já era esperado pelas eqs. (A.13), em que o Hamiltoniano de mistura de bandas só retorna elementos da base com spins trocados. Conclui-se, também, que o diagrama de Landau descrito pelo Hamiltoniano da eq. (A.14), o qual descreve o sistema, não depende dos Hamiltonianos de Rashba e Dressenhaus, apenas do de mistura de bandas.

Definido o Hamiltoniano do sistema pela eq. (A.1) e a DOS pela eq. (2.66), ao fixarmos uma densidade de elétrons no sistema, a ε_F oscila como uma função do $\hbar\omega_c$, como

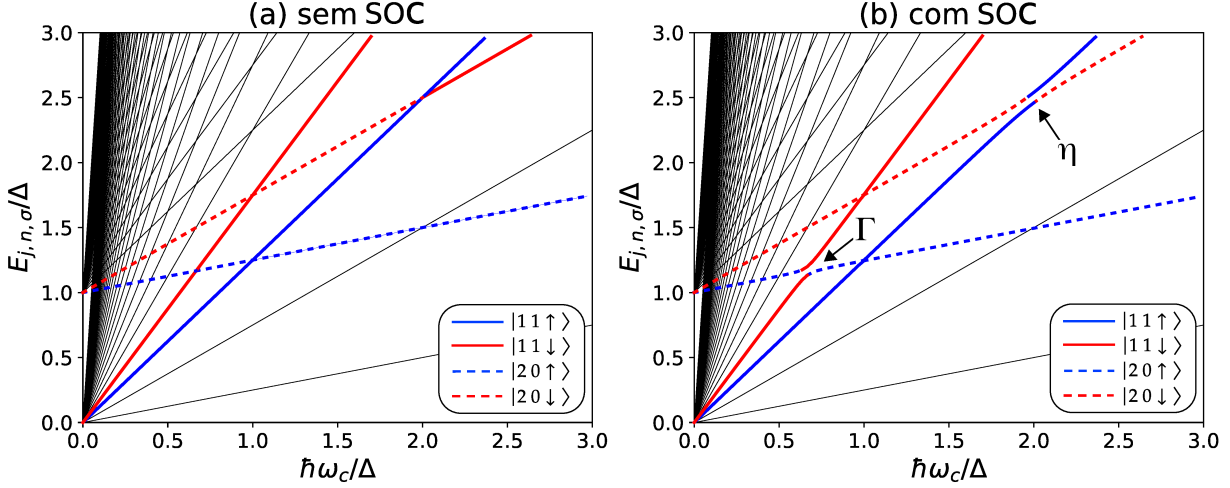


Figura 20 – Landau *fan* para as sub-bandas $j = \{1, 2\}$, para $n = 0$ e $n = 1$, com $\xi = -0, 25$. Em (a), temos a configuração do sistema sem SOC, enquanto que em (b), com SOC, o que abre os *gaps* Γ e η nos cruzamentos de bandas de energia diferentes e spins opostos. Fonte: os autores.

ilustra o gráfico da Fig. 21 (a). Para um valor de campo magnético específico, por exemplo, $\hbar\omega_c = 1$, a DOS é calculada para cada cruzamento dos LLs (vide Fig. 21 (b)). A densidade de elétrons, fixando o valor de B , aumenta conforme a energia do sistema, ou seja, conforme os LLs são preenchidos por ν (vide Fig. 21 (c)).

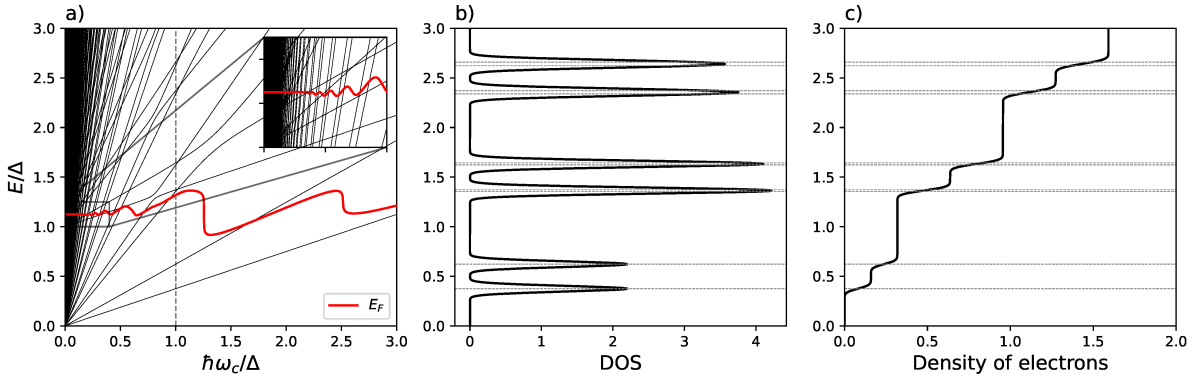


Figura 21 – (a) Landau *fan* para um 2DEG com a ε_F variando em função do $\hbar\omega_c$. Veja que para valores de campo próximos de zero, ε_F é aproximadamente constante; (b) DOS calculada para $\hbar\omega_c = 1$ (linha tracejada em (a)); (c) densidade de elétrons calculada para este mesmo valor de $\hbar\omega_c$ escolhido. Fonte: os autores.

O efeito SdH é caracterizado pela presença de oscilações na magneto-resistência quando a ε_F cruza um nível de Landau. Em outras palavras, avaliamos as oscilações de SdH quantizando o espectro de energia dos LLs à medida que cruzam o nível de Fermi. Na Fig. 22, temos os valores determinados numericamente no Kwant para o IQHE: quando $B \rightarrow 0$, a resistividade longitudinal ρ_{xx} é aproximadamente constante, e a resistividade Hall, ρ_{xy} , aumenta linearmente como função do campo, como esperado pelo modelo de Drude. Note que, no *inset* desse gráfico, a transição entre o regime do HE e o IQHE, é

caracterizada por pequenas oscilações, que são exatamente SdH. Perceba também que, conforme B aumenta, maior é a largura de ρ_{xx} , haja vista que $\rho_{xx} \propto g_{2D}(\varepsilon_F)$, como já foi demonstrado no trabalho.

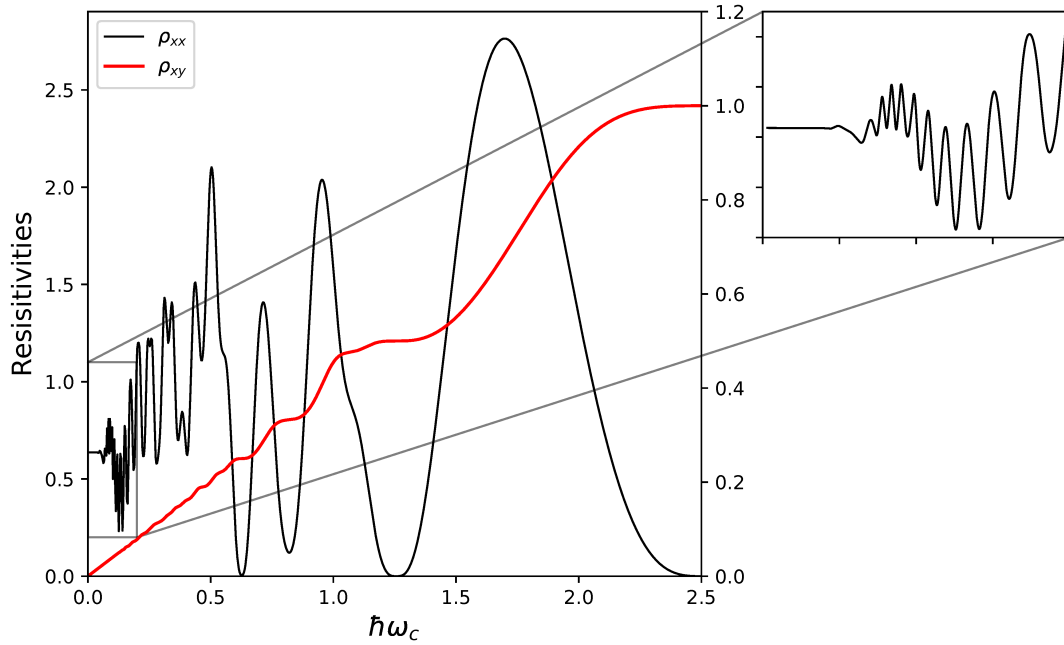


Figura 22 – Resistividades no regime do IQHE. Para valores de $\hbar\omega_c \rightarrow 0$, temos o regime do HE, como esperávamos pelo modelo de Drude. No *inset*, as oscilações de SdH, que tem origem qualitativa nos picos da ε_F ao cruzar os LLs. Fonte: os autores.