Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Propagação de excitações de carga e spin em isolantes topológicos 2D

Marcos Henrique Lima de Medeiros

Orientador: Prof. Dr. Luis Gregório G. de V. Dias da Silva

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo, como requisito parcial para
a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luis Gregório G. de V. Dias da Silva (IF - Universidade de São Paulo)

Prof. Dr. Gerson J. Ferreira (InFis - Universidade Federal de Uberlândia)

Prof. Dr. Guilherme Sipahi (IFSC - Universidade de São Paulo)

São Paulo
2017

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Medeiros, Marcos Henrique Lima de

Propagação de excitações de carga e spin em isolantes topológicos 2D. São Paulo, 2017.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Depto. de Física dos Materiais e Mecânica.

Orientador(a): Prof. Dr. Luis Gregório Godoy de Vasconcellos Dias da Silva

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Unitermos: 1. Propriedades dos sólidos; 2. Efeito Hall; 3. Eletrônica quântica; 4. Isolantes topológicos; 5. Física computacional.

USP/IF/SBI-083/2017

University of São Paulo
Physics Institute

Propagation of charge and spin excitations on topological insulators 2D

Marcos Henrique Lima de Medeiros

Supervisor: Prof. Dr. Luis Gregório G. de V. Dias da Silva

Dissertation submitted to the Physics Institute of the
University of São Paulo in partial fulfillment of the
requirements for the degree of Master of Science.

Examining Committee:

Prof. Dr. Luis Gregório G. de V. Dias da Silva (IF - University of São Paulo)

Prof. Dr. Gerson J. Ferreira (InFis - Federal University of Uberlândia)

Prof. Dr. Guilherme Sipahi (IFSC - University of São Paulo)

São Paulo
2017

Aos meus pais, Gecilene e Marcos, meus mestres
fundamentais.

Agradecimentos

Escrever uma dissertação de mestrado é um processo árduo que, além de exigir a dedicação e a sistemática científica do mestrando, acaba trazendo à tona sentimentos incontrolláveis como a angústia e a ansiedade. O meio acadêmico exige uma certa resiliência a esses sentimentos, por isso, durante todo o período em que estive trabalhando na escrita dessa dissertação, tive comigo um outro sentimento: a gratidão às pessoas e instituições que enumero a seguir.

Ao Prof. Dr. Luis Gregório Dias da Silva, agradeço por ser um orientador compreensivo e dedicado, que sempre esteve à disposição para me ensinar e ajudar, tanto no que se refere a assuntos acadêmicos quanto no que tange a vida pessoal. Agradeço pelas vezes que fez mais do que lhe cabia como orientador, e acabou tornando-se um amigo. Por fim, agradeço por influir positivamente na minha formação como cientista e como ser humano.

Agradeço ao Prof. Dr. Gerson J. Ferreira, pelas dicas e pelo incentivo inestimável para a conclusão desse trabalho. E principalmente pela disponibilidade para discussões.

Aos meus pais, Gecilene Lima dos Santos e Marcos Antônio de Medeiros, agradeço pelo amor incondicional, pela compreensão, pelo incentivo e pela educação baseada no respeito mútuo e no carinho. Serei sempre grato pelo esforço dedicado à minha educação formal e acadêmica – nenhuma letra aqui escrita seria possível sem vocês.

Agradeço também a minha atual namorada, Lara Akemi Lucchezi Miyahara, pela compreensão, paciência e companheirismo. Pelos dias que em que somente me observou trabalhar e pelas vezes que em que ativamente contribuiu para a sua conclusão.

Agradeço também:

Aos amigos que dividem comigo o lar que habitei durante mais da metade do período dedicado às atividades de mestrado, pela amizade e parceria: Ana, Erick, Laércio e Lucas.

Aos colegas do Departamento de Física dos Materiais, que me ajudaram nesta jornada direta e indiretamente, seja por meio de discussões sobre o trabalho seja pela inestimável amizade: Bruno Ipaves, Samuel Silva, Luis dos Santos, Ivan Miranda, Arthur Camargo, Eduardo Suárez,

Ana Valencia, Filipe Dalmatti, David Tijerina, Amina Ribeiro, Flávio Moraes, Fábio Abud, Gabriel Oliveira e Gerson Pessotto.

Aos meus colegas de sala Dimy Nanclares, Raphael Levy e Jesús Cifuentes, pelas calorosas discussões sobre isolantes topológicos 2D, que serviram muito para a construção do meu entendimento do assunto tratado neste trabalho de mestrado;

Aos funcionários do Departamento, em especial à Sandra e à Rosana, por toda ajuda administrativa;

Às Prof.^a Dr.^a Lucy Vitória Credidio Assali e Prof.^a Dr.^a Euzi Conceição Fernandes da Silva, por toda ajuda em momentos complicados.

Aos meus amigos do IFUSP, Vitor Gonçalves, Mariana Jó, Mayara Palmieri, Marcela Muniz, Gabriel Salimeni e outros, por fazerem dos meus anos de graduação os mais divertidos e agradáveis que alguém poderia desejar.

À todos os professores que tive durante minha vida acadêmica, tanto na Universidade de São Paulo quanto nas Escolas Estaduais “Professor Vicente Themudo Lessa” e “Demilson Soares Molica”, por toda a base que me deram apesar das dificuldades que o sistema público de ensino básico sofre no Brasil.

Às agências de fomento à pesquisa, FAPESP, CAPES e CNPq, pelo indispensável apoio financeiro e pela concessão de auxílios para conferências.

Resumo

Neste trabalho, nossa principal motivação foi o entendimento da dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D. Como excitações de carga se movem nesses materiais? De que maneira essas trajetórias dependem das condições iniciais, e de que forma as condições de contorno influenciam nessa dinâmica? Essas foram algumas das perguntas que guiaram nosso trabalho.

Através de simulações computacionais, estudamos o movimento de pacotes de onda gaussianos em poços quânticos de HgTe/CdTe. O comportamento de isolante topológico para essa heteroestrutura foi prevista teoricamente no importante trabalho de Bernevig et al. [1] e confirmada experimentalmente por König et al. [2]. Estudando-se a evolução temporal desse sistema, foi possível observar trajetórias que dependem de forma evidente, não apenas da orientação de spin, mas também da orientação de um pseudo-spin proveniente do modelo BHZ.

Em sistemas com condições de contorno periódicas em ambas as dimensões e sem a aplicação de campos externos, foram observadas trajetórias com formato de espiral, acompanhadas por um *side-jump* dependente da direção do spin e do pseudo-spin. Em especial, para o caso em que o pseudo-spin está inicialmente orientado na direção-z, as trajetórias espiraladas foram substituídas por um padrão do tipo *zitterbewegung* dependente de um potencial de *bias*. Para sistemas confinados com bordas impenetráveis, observou-se a formação de estados de borda helicais característicos de isolantes topológicos.

Palavras-chave: Modelo BHZ; Efeito Hall quântico; Spintrônica; Isolantes topológicos; Física computacional.

Abstract

In this work, our main motivation was the understanding about the dynamics of wave packets in 2D topological insulators. How charge excitations move throughout these materials? In what way their trajectories depend on the initial conditions, and how boundary conditions change this dynamics? These were some of the questions that have guided us in our work.

Using numerical simulations, we have studied the movement of Gaussian wave packets in HgTe/CdTe quantum wells. The topological insulator behavior for this heterostructure was theoretically predicted on the important work conducted in 2006 by Bernevig et al. [1], and experimentally confirmed by König et al. [2] a year later. Studying the time evolution of this system, was possible to observe trajectories that depend evidently, not only from the spin projection, but also from the pseudospin orientation coming from the BHZ model.

From simulations with periodic boundary conditions in both of the two dimensions, and without the application of any external fields, we observed spiral trajectories accompanied by a spin and pseudospin dependent side-jump. Especially, for the case in which the pseudospin was initially oriented in “z” direction, the spiral trajectories were replaced by a pattern of the type *zitterbewegung* dependent of a bias potential. For the confined systems with barriers of hardwall type, was observed the formation of helical edge states, that is the fingerprint of topological insulators.

Keywords: BHZ model; Quantum Hall effect; Spintronics; Topological insulators; Computational physics.

Sumário

1	Introdução	23
1.1	Efeito Hall	23
1.2	Efeito Hall Quântico de Spin	27
1.3	Hamiltoniano BHZ	28
1.4	Visão geral do trabalho	30
2	Método Numérico	31
2.1	Método Leapfrog	32
2.2	Métodos de Runge-Kutta	33
2.2.1	Runge-Kutta de segunda ordem	34
2.2.2	Runge-Kutta de terceira ordem	35
2.2.3	Runge-Kutta de quarta ordem	35
2.3	Resultados para os Métodos de Runge-Kutta	35
2.4	Métodos de Runge-Kutta com passo Adaptativo	37
2.5	Limitação do método de Diferenças Finitas	40
2.6	Fourier Split	41
2.6.1	Implementação Numérica	42
2.6.2	Pacote Gaussiano 1D	43
2.7	Considerações preliminares	45
3	Acoplamento Spin-Órbita de Rashba	47
3.1	Acoplamento Spin-Órbita	47
3.2	Hamiltoniano de Rashba	49
3.3	Dinâmica de ondas planas em um sistema Rashba	52
3.3.1	Caso unidimensional	52

3.3.2	Caso bidimensional	56
3.4	Dinâmica de Pacotes de Onda em sistemas Rashba	57
3.4.1	O problema do Fermion Doubling	57
3.4.2	Diferenças Finitas <i>Runge-Kutta</i>	63
3.4.3	Resultados para a evolução temporal com Runge-Kutta de 4 ^a ordem . . .	65
3.4.4	Unidades Adotadas	68
3.4.5	Resultados do método de Fourier 1D	69
3.4.6	Resultados do método de Fourier 2D	70
3.4.7	Zitterbewegung	77
4	Poços Quânticos de <i>HgTe</i>	83
4.1	Inversão de Bandas	84
4.2	Evolução Numérica em isolantes topológicos 2D (modelo BHZ)	87
4.2.1	Sistema infinito com condições de contorno periódicas	87
4.2.2	Sistema definido por um canal retangular (ou <i>strip</i>)	91
4.3	Dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D	95
4.3.1	O conceito de pseudo-spin	95
4.3.2	Pseudo-spin na direção-x	96
4.3.3	Pseudo-spin na direção-y	102
4.3.4	Pseudo-spin na direção-z	106
4.4	Conclusões preliminares	107
5	Conclusões	113
5.1	Métodos numéricos	113
5.2	Dinâmica com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba	113
5.3	Dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D	114
5.4	Possíveis desdobramentos do trabalho e perspectivas futuras	115

Lista de Figuras

- 1.1 Esquema de um sistema onde se aplica um campo magnético $\vec{B}$ perpendicular a um barra 2D, de largura L , por onde passa uma corrente I . Nesse tipo de sistema, mede-se um potencial V_H transversal a corrente. 24
- 1.2 A resistividade Hall possui comportamento quantizado dependente de B . No gráfico vemos os valores de resistividade para $\nu = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10$. Vemos também o comportamento da resistividade longitudinal ρ_{xx} que cai para zero nos intervalos de valores de B referentes aos platôs de resistência Hall. Imagem retirada de [3] acessado em 25 de Abril de 2017. 26
- 1.3 Formação de pares de estados de borda helicais em sistemas com QSHE. 27
- 2.1 (a) Evolução do erro com o tempo para os métodos de Runge-Kutta de segunda, terceira e quarta ordem (**RK2**, **RK3** e **RK4** respectivamente) e do método Leap-frog (**LF**). Para as simulações foram definidos os seguintes valores: $dx = 0.2$, $\sigma = 2$ e $k_0 = 2$. (b) Erro obtido da simulação com o método Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) para um passo de discretização espacial bem menor dado por $dx = 0.01$. Nota-se que neste caso específico temos uma instabilidade que destrói qualquer semelhança entre os resultados numéricos e analíticos.). 37
- 2.2 (a) Evolução temporal dos erros obtidos para o método Runge-Kutta adaptativo de quarta-quinta ordem com coeficientes de Cash-Karp (RKCK45). Nas quatro simulações utilizou-se as discretizações apresentadas. (a) Comparação entre os erros obtidos quando os parâmetros σ e k_0 da condição inicial são variados nas simulações usando o método RKCP45 e com $dx = 0.2$ 40
- 2.3 Evolução temporal de um pacote de ondas gaussiano unidimensional via Fourier-Split. Os pontos discretos mostram os resultados obtidos analiticamente enquanto as curvas contínuas representam as soluções numéricas. 44

2.4	Comparação entre os erros (definido pela expressão (2.25)) obtidos utilizando os métodos de Fourier split e RKCK45, que apresentaram os melhores resultados em termos de propagação do erro numérico.	45
3.1	(a): Relação de dispersão de um sistema Rashba onde os paraboloides vermelho e azul são os gráficos para $E_+(\mathbf{k})$ e $E_-(\mathbf{k})$ respectivamente; (b): Para uma energia bem definida, os valores de vetor de onda $\mathbf{k}$ assumem valores sobre as circunferências dadas. As cores das circunferências correspondem às paraboloides apresentadas na fig. (a) e as setas indicam a orientação de spin dos autoespinores do Hamiltoniano Rashba.	51
3.2	Relação de dispersão de um sistema Rashba unidimensional em que a curva vermelha e azul são os gráficos para $E_+(\mathbf{k})$ e $E_-(\mathbf{k})$ respectivamente.	53
3.3	Dependência do autovalor do operador momento $\hat{p}$ com o número de onda k para os casos contínuo (Cont.) e discreto. Para fins de simplicidade, adotou-se $\hbar = 1$ e $a = 0.5$	60
3.4	Dependência do autovalor do operador momento ao quadrado $\hat{p}^2$ com o número de onda k para os casos contínuo (Cont.) e discreto. Para fins de simplicidade, adotou-se $\hbar = 1$ e $a = 0.5$	62
3.5	Diagrama representativo das dependências da evolução temporal de cada uma das componentes do spinor Ψ	64
3.6	Propagação de um pacote de ondas unidimensional com acoplamento <i>spin-órbita</i> de Rashba, obtido pelo algoritmo de Runge-Kutta de quarta-ordem com $dt/(dx)^2 = 1/4$. Os gráficos acima são referentes aos seguintes instantes: a) $t = 0$, b) $t = 668 \times \delta t$, c) $t = 1335 \times \delta t$, $\delta t = 0.0025$	66
3.7	Relação de dispersão de um sistema Rashba unidimensional em que a curva vermelha e azul, neste caso, são os gráficos para os autoestados de spin $ s_y, +\rangle$ e $ s_y, -\rangle$ respectivamente. Perceba que as cores não são exatamente iguais àsquelas do gráfico da fig. (3.2). Num mesmo ramo de energia há mudança de orientação de spin quando k_x muda de sinal.	67

LISTA DE FIGURAS

- 3.8 Evolução temporal do pacote Gaussiano unidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 100.0 \text{ meV nm}$. Os parâmetros da simulação foram: comprimento do sistema $L = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N_x = 2000$; largura do pacote $\sigma = 15 \text{ nm}$; número de onda médio $\bar{k}_x = 0$. A figura (3.8a) é a condição inicial, que é dada pelo autovetor de $\hat{S}_x$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$, multiplicado por uma função gaussiana. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.8b) $t = 0.1 \text{ ps}$, (3.8c) $t = 0.3 \text{ ps}$, (3.8d) $t = 0.5 \text{ ps}$ 71
- 3.9 Evolução temporal do pacote Gaussiano unidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0 \text{ meV nm}$. Os parâmetros da simulação foram: comprimento do sistema $L = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N = 2L$; “largura do pacote” $\sigma = 15 \text{ nm}$; número de onda médio $\bar{k}_x = 0$. A figura (3.9a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$, que é o autovetor “+” de $\hat{S}_y$, multiplicado por uma função gaussiana. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.9b) $t = 0.2 \text{ ps}$, (3.9c) $t = 0.4 \text{ ps}$, (3.9d) $t = 0.6 \text{ ps}$ 72
- 3.10 Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0 \text{ meVnm}$. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000 \text{ nm}$ e $L_y = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20 \text{ nm}$, $d_y = 20 \text{ nm}$. A figura (a) é a condição inicial, que é dada pelo autovetor “+” de $\hat{S}_x$, ou seja $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (b) $t = 0.2 \text{ ps}$, (c) $t = 0.6 \text{ ps}$, (d) $t = 0.8 \text{ ps}$ 74
- 3.11 Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0 \text{ meVnm}$. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000 \text{ nm}$ e $L_y = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20 \text{ nm}$, $d_y = 20 \text{ nm}$. A figura (a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $(1, 0)$, o autovetor “+” de $\hat{S}_z$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (b) $t = 0.2 \text{ ps}$, (c) $t = 0.6 \text{ ps}$, (d) $t = 0.8 \text{ ps}$ 75

- 3.12 Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0$ meVnm. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000$ nm e $L_y = 1000$ nm; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20$ nm, $d_y = 20$ nm; o vetor de onda médio é tal que a velocidade do pacote livre seria $\mathbf{v}_x = 500\hat{i}$ nm/ps. A figura (3.12a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $(1, 0)$ que é autovetor “+” de $\hat{S}_z$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.12b) $t = 0.2$ ps, (3.12c) $t = 0.6$ ps, (3.12d) $t = 0.8$ ps. 76
- 3.13 Evolução temporal do valor esperado $\langle y(t) \rangle$ num sistema com acoplamento de Rashba e campo elétrico *in-plane* na direção- x . Usou-se duas condições iniciais diferentes para as simulações: um pacote de ondas gaussiano multiplicado por $|\uparrow_z\rangle$; o mesmo pacote gaussiano multiplicado por $|\downarrow_z\rangle$ 79
- 3.14 Comparação dos resultados obtidos para o valor esperado $\langle y(t) \rangle$ de forma numérica, com diferentes condições iniciais, e do resultado analítico obtido para onda plana. As curvas que se referem aos pacotes de onda possuem diferentes larguras (d ’s), como mostrado na legenda. Vê-se que quanto maior a largura do pacote gaussiano, mais próximo o resultado numérico será do resultado para onda plana. Todos os resultados se referem a condições iniciais spin-polarizadas em $\uparrow_z$ 81
- 4.1 Tipos de Heteroestruturas conforme a estrutura de bandas dos materiais participantes da estrutura. Note-se que, em todos os esquemas, tem-se representados os topos das bandas de valência e os valores mais baixos assumidos pelas bandas de condução. 83
- 4.2 Ordenamento *usual* da estrutura de bandas de um semiconductor obtida por meio do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ incluindo a interação *spin-órbita*. Vê-se, além da banda de condução, as bandas conhecidas como *heavy hole band (HH)*, *light hole band (LH)* e *split-off band (SO)*. 84

LISTA DE FIGURAS

- 4.3 Ordenamento das bandas de energia próximas ao *gap* de energia para o semicondutor *CdTe* e para o semimetal *HgTe*. Em uma análise das figuras pode-se ver o que se classifica como ordenamento invertido da estrutura de bandas do *HgTe*, uma vez que as bandas tipo-*p* que representavam bandas de valência na maioria dos semicondutores, representam bandas de condução para o semimetal *HgTe*. As estruturas de bandas estão apresentadas de forma qualitativa, de modo a mostrar o caráter invertido das bandas de *HgTe*. Os exatos valores dos "gaps" e as formas exatas das curvas não foram levadas em consideração. 85
- 4.4 Diagramas de bandas de poços quânticos de *CdTe/HgTe/CdTe*. Em linhas tracejadas vê-se as sub-bandas dos estados $|E1\rangle$, $|H1\rangle$, que trocam de ordem em energia quando a espessura do poço quântico ultrapassa o valor crítico d_C 86
- 4.5 Estruturas de bandas de um *quantum well* com "hardwalls" na direção *y* para as componentes de spin $\uparrow$ e $\downarrow$. Na dimensão *y* temos uma *strip* de 200 nm enquanto que na dimensão *x* temos condição de contorno periódica. Os pontos demarcados por N_y e $N_y + 1$ se referem a diferentes bandas de energia e mostram como são numeradas as diferentes bandas obtidas via diagonalização da representação matricial do operador Hamiltoniano. 93
- 4.6 Densidades de probabilidades de estados de "edge", calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0$. (a): spinor *up*; (b): spinor *down*. 94
- 4.7 Densidades de probabilidades de estados de "edge", calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0.01 \text{ nm}^{-1}$. (a): spinor *up*; (b): spinor *down*. 94
- 4.8 Densidades de probabilidades de estados de "edge", calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0.1 \text{ nm}^{-1}$, ou seja, funções de onda referentes aos autovalores indicados na Fig.(4.5). (4.8a): spinor *up*; (4.8b): spinor *down*. 95

- 4.9 Posição média de pacotes gaussianos inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momento médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de 1500×1500 nm com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x(y) = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 2$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: 4.9a) $(+1, +1, +1, -1)$; 4.9b) $(+1, -1, +1, +1)$. 97
- 4.10 Evolução temporal de pacotes de onda onde o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ ps (condição inicial), $t_2 = 0.3$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, 1, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, 1)$ 98
- 4.11 Evolução de um pacote de onda onde o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.3$ ps, $t_3 = 0.7$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, -1, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, -1)$ 99
- 4.12 Contribuições dos autoestados do Hamiltoniano *BHZ* na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.10) e (4.11) que aqui são dadas por: (4.12a): para a condição inicial $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_x\rangle$; (4.12b): $|\psi_{\downarrow}, \uparrow_x\rangle$; (4.12c): $|\psi_{\uparrow}, \downarrow_x\rangle$; e (4.12d): $|\psi_{\downarrow}, \downarrow_x\rangle$ 100
- 4.13 Pacotes gaussianos inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_x(y) = 75.0$ nm e momentum médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de 1500×1500 nm com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x(y) = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 2$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: 4.13a) $(+1, +i, +1, +i)$; 4.13b) $(+1, -i, +1, -i)$ 102
- 4.14 Evolução de um pacote de onda gaussiano numa “*strip*” em que o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Os coeficientes do spinor total, definido em (4.19), foram: **esquerda** $(1, i, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, i)$. 103

LISTA DE FIGURAS

- 4.15 Evolução de um pacote de onda gaussiano numa “*strip*” com tempo evoluindo no sentido de cima para baixo. Os instantes de cada uma das linhas são: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, -i, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, -i)$ 104
- 4.16 Contribuições dos autoestados da Hamiltoniana na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.14) e (4.15) que aqui são dadas por: (4.16a): para a condição inicial $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_y\rangle$; (4.16b): $|\psi_{\downarrow}, \uparrow_y\rangle$; (4.12c): $|\psi_{\uparrow}, \downarrow_y\rangle$; e (4.16d): $|\psi_{\downarrow}, \downarrow_y\rangle$ 105
- 4.17 Condição inicial definida por pacotes gaussianos centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_{x(y)} = 150.0$ nm e momento médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de $4 \times 4 \mu\text{m}$ com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x = \Delta y = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 4.0$ ps. O sistema foi submetido a um potencial de *bias* $V_b = -10^{-3}x$ meV. 107
- 4.18 Evolução de um pacote de onda gaussiano inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com largura definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momento médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. Nesse caso o sistema possui é dado por um canal onde as dimensões são de 2000×200 nm. Nessa situação usamos condições de contorno periódicas na dimensão x (horizontal) e hardwall na direção y (vertical). A discretização do espaço usada aqui foi $\Delta x = 0.1$ nm e $\Delta y = 2.0$ nm. O tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, 0, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, 0)$ 108

4.19	Evolução de um pacote de onda gaussiano inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com largura definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momentum médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. Nesse caso o sistema possui é dado por um canal onde as dimensões são de 2000×200 nm. Nessa situação usamos condições de contorno periódicas na dimensão x (horizontal) e hardwall na direção y (vertical). A discretização do espaço usada aqui foi $\Delta x = 0.1$ nm e $\Delta y = 2.0$ nm. O tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: esquerda $(0, 1, 0, 0)$; direita $(0, 0, 0, 1)$	109
4.20	Contribuições dos autoestados da Hamiltoniana na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.18) e (4.19) que aqui são dadas por: (4.20a): para a condição inicial $ \psi_{\uparrow}, \uparrow_z\rangle$; (4.20b): $ \psi_{\downarrow}, \uparrow_z\rangle$; (4.20c): $ \psi_{\uparrow}, \downarrow_z\rangle$; e (4.20d): $ \psi_{\downarrow}, \downarrow_z\rangle$	110

Lista de Tabelas

2.1	Coeficientes para o método Runge-Kutta <i>Embedded</i> de Cash-Karp	38
3.1	Unidades e valores adotados para as constantes físicas.	68

Capítulo 1

Introdução

Esse trabalho se propõe a estudar a dinâmica de excitações de cargas em isolantes topológicos bidimensionais. Especificamente, os sistemas de interesse dessa dissertação são pacotes de onda gaussianos em poços quânticos de $HgTe/CdTe$. Por meio de métodos computacionais, pretende-se obter a evolução temporal destes pacotes no regime balístico, ou seja, sem a presença de espalhamento por impurezas.

Apesar da aparente simplificação, muitas observações importantes podem ser realizadas nesse regime. Há, por exemplo, um enorme interesse em se estudar tais sistemas na presença de confinamento, seja esse confinamento do tipo “barreira infinita” seja por um potencial com formato de degrau finito. Isso porque isolantes topológicos estão intimamente relacionados com os sistemas em que se observa o *Efeito Hall Quântico de Spin* (onde QSHE é a sigla do termo em inglês e será usada no restante do texto). Assim o fato de não termos centros de espalhamento permite que inicialmente se foque na relação entre dinâmica e confinamento.

Nesse capítulo inicial, apresento uma resumida história do esforço dedicado ao entendimento da dinâmica eletrônica em sistemas $2D$ e esboço os passos que trouxeram a topologia para dentro desse contexto.

1.1 Efeito Hall

O efeito hoje conhecido como *Efeito Hall* foi observado pela primeira vez por Edwin H. Hall em 1879 [4]. Revisando-o sucintamente, considere uma amostra aproximadamente bidimensional de um material sólido (uma “barra Hall”) submetida a uma diferença de potencial responsável por gerar uma corrente elétrica I que flui ao longo do comprimento da amostra (1.1). Se,

Figura 1.1: Esquema de um sistema onde se aplica um campo magnético $\vec{B}$ perpendicular a um barra 2D, de largura L , por onde passa uma corrente I . Nesse tipo de sistema, mede-se um potencial V_H transversal a corrente.

além disso, for aplicado um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ perpendicular ao plano da amostra, pode-se prever classicamente que os elétrons que se movem pela placa terão suas trajetórias desviadas devido a força de Lorentz e se acumularão próximo a uma das bordas. Esse acúmulo de cargas irá cessar quando a força devida ao campo elétrico $\mathbf{E}$ produzido por essas mesmas cargas equilibrar a força devida ao campo magnético $\mathbf{B}$. Dessa maneira, no equilíbrio tem-se que

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

onde $\mathbf{v}$ e q são o vetor velocidade e o valor da carga das partículas, respectivamente. A diferença de potencial induzido nas bordas será $V = EL$, com L sendo a largura da amostra, e a corrente pela amostra será $I = q\rho_e vL$, onde ρ_e é a densidade de portadores de carga da amostra. Dessa forma é possível obter o que se denomina a resistência Hall

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{B}{q\rho_e}. \quad (1.2)$$

Em trabalhos subsequentes do próprio Edwin Hall, mediu-se a resistência Hall de metais ferromagnéticos e paramagnéticos, observou-se a existência de uma contribuição à resistência Hall além daquela com dependência linear com o campo magnético dada por (1.2). Em materiais ferromagnéticos, essa nova contribuição deveria ser proporcional a magnetização M , de modo que podemos escrever a seguinte relação empírica

$$R_H = R_0 B + R_A M. \quad (1.3)$$

Com esse termo adicional, o efeito Hall poderia ser observado mesmo na ausência de campos magnéticos. Depois de quase um século, este fenômeno foi entendido como uma consequência do surgimento de uma velocidade anômala dos elétrons. Esta velocidade tem direção perpendicular ao campo elétrico responsável pela corrente e, por isso, contribui com a condutância Hall. Sabemos hoje que esta velocidade está relacionada a variação da fase das funções de Bloch que, com a aplicação de um campo elétrico, é levada a evoluir no espaço de momentos [5, 6].

De forma geral e resumida, podemos falar de origens extrínsecas e intrínsecas para o efeito Hall anômalo. A parte extrínseca é devida a presença de processos de espalhamento dependentes de spin devido a desordem e impurezas. A parte intrínseca, por sua vez, é devida a uma dependência com o spin da estrutura de bandas dos elétrons de condução. No tratamento teórico desse fato, fases de Berry no espaço de momentos aparecem como ferramentas úteis e elegantes. Fisicamente, o acoplamento entre o movimento orbital do elétron e seu spin, o chamado *acoplamento spin-órbita*, é o principal responsável por esses efeitos, sejam eles classificados como intrínsecos ou extrínsecos [7].

Mesmo sem a presença de campo magnético $\mathbf{B}$ ou de magnetização M , o acoplamento spin-órbita continua a produzir efeitos mensuráveis. Quando um elétron se move através de um campo elétrico externo ele experimenta uma força transversal dependente da corrente de spin, diferentemente da força de Lorentz que depende da corrente de carga. Essa força transversal dependente de spin leva a uma deflexão das trajetórias de modo que elétrons com orientação de spin diferentes são acumulados em bordas opostas na amostra. Para esse efeito, conhecido como *Efeito Hall de Spin*, também se descobriu origens intrínsecas e extrínsecas [2].

No ano de 1980, von Klitzing, Dorda e Pepper ao estudarem um gás de elétrons bidimensional confinado em uma heteroestrutura semicondutora, descobriram que quando o sistema é submetido a um forte campo magnético a resistividade transversal (resistividade Hall) assume valores quantizados

$$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{\nu e^2} \quad (1.4)$$

(onde $\nu = 1, 2, \dots$) e forma platôs quando varia-se a magnitude do campo magnético. A resistividade ρ_{xx} longitudinal, por outro lado, torna-se nula nos mesmos valores de $\mathbf{B}$ em que se

Figura 1.2: A resistividade Hall possui comportamento quantizado dependente de B . No gráfico vemos os valores de resistividade para $\nu = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10$. Vemos também o comportamento da resistividade longitudinal ρ_{xx} que cai para zero nos intervalos de valores de B referentes aos platôs de resistência Hall. Imagem retirada de [3] acessado em 25 de Abril de 2017.

observa os platôs de ρ_{xy} e salta em picos quando há transição entre esses platôs, ou seja, quando há mudança do valor de ν [8]. Ambos os comportamentos podem ser vistos no gráfico da figura (1.2). Atualmente, esse comportamento, conhecido como Efeito Hall Quântico (QHE na sigla em inglês), já é bem entendido e pode ser descrito por meio de orbitais de um único elétron em campos magnéticos.

Descrevendo de forma resumida, o comportamento de elétrons na presença de um campo magnético uniforme é equivalente àquele de elétrons em um potencial de oscilador harmônico. Isso significa, que as energias dos autoestados serão dadas por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c, \quad (1.5)$$

onde $\omega_c = eB/m$ é a chamada frequência ciclotron. Os chamados *níveis de Landau* dados por (1.5) são altamente degenerados e se o número de níveis de Landau completamente ocupados for ν então a condutância Hall é dada por

$$\sigma_{xy} = \rho_{xy}^{-1} = \nu \frac{e^2}{2\pi\hbar}. \quad (1.6)$$

Ou seja, ν age como um *invariante topológico*, tendo em vista que seu valor é totalmente

Figura 1.3: Formação de pares de estados de borda helicais em sistemas com QSHE.

independente de detalhes da geometria do sistema e possui uma marcante robustez com relação aos parâmetros externos.

1.2 Efeito Hall Quântico de Spin

O Efeito Hall Quântico de Spin (QSHE), foi proposto teoricamente por Charles Kane e Eugene Mele como uma generalização do modelo de Duncan Haldane, cujo trabalho prevê o surgimento do efeito Hall Quântico num sistema de elétrons “sem spin” em uma rede discreta em que há um campo magnético periódico [9]. Em contrapartida, no trabalho de Kane e Mele o sistema considerado foi o de elétrons com spin-1/2 em uma rede de grafeno com o campo magnético sendo substituído por um forte acoplamento spin-órbita [10]. No entanto, dado o pequeno valor do acoplamento spin-órbita, o QSHE no grafeno não se mostrou realizável.

Em um trabalho teórico escrito por Bernevig, Hughes e Zhang foi proposta a possibilidade de se observar o QSHE em poços quânticos de CdTe/HgTe/CdTe [1]. Devido ao fato do material HgTe possuir estrutura de bandas *invertida* enquanto que CdTe possui uma estrutura de bandas normal, é possível obter uma transição de fase topológica ao variarmos a espessura da camada de HgTe. A confirmação experimental veio no ano seguinte com o trabalho de König et al. [2].

Em sistemas com QSHE há a formação de estados de borda dependentes de spin. Nesses estados, elétrons com orientações diferentes de spin se movem em direções opostas formando pares de estados helicais como exemplificado pictoricamente na Figura 1.3. Devido à manutenção da simetria de reversão temporal, processos de retroespalhamento são proibidos, o que torna esses estados de borda robustos com relação a impurezas e desordem.

Os sistemas que apresentam o efeito descrito nessa seção são também conhecidos como *Isolantes Topológicos 2D* e serão o foco desse trabalho de mestrado. Em especial, iremos

abordar a questão da dinâmica em poços quânticos de HgTe e da formação dos efeitos de borda.

1.3 Hamiltoniano BHZ

Isolantes topológicos (ITs) são materiais isolantes no “bulk” mas com estados de borda metálicos topologicamente protegidos, sendo assim fundamentalmente distintos de isolantes usuais. Apesar da grande atividade recente no estudo destes materiais, várias questões sobre como excitações de carga e spin se propagam nesses materiais. Neste contexto, pretendemos abordar essa questão usando métodos computacionais para o cálculo da dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D. Concretamente, verificaremos como a evolução temporal de excitações no Hamiltoniano BHZ, que contém os elementos fundamentais de estados eletrônicos em poços quânticos de HgTe, sistema objeto das principais investigações experimentais de ITs em duas dimensões. Nosso objetivo é entender o papel dos estados de borda spin-polarizados helicais na evolução temporal de pacotes de onda deste sistema.

O Hamiltoniano BHZ [1, 11, 12] na ausência de campos eletromagnéticos pode ser escrito como

$$\hat{H}_{BHZ} = \mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} [\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2] + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar}\hat{p}_x + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar}\hat{p}_y \quad (1.7)$$

onde $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{D}$ e $\mathcal{M}$ são parâmetros numéricos, $\mathbf{1}$, Γ_1 , Γ_2 e Γ_5 são matrizes de dimensão 4×4 na base de estados de elétrons e buracos $\{|E \uparrow\rangle, |H \uparrow\rangle, |E \downarrow\rangle, |H \downarrow\rangle\}$:

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad \Gamma_2 = \begin{pmatrix} -\sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix} \text{ e } \Gamma_5 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

onde $\sigma_{x,y,z}$ são as matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Embora o espectro do Hamiltoniano descrito pela Eq. (1.7) seja bem conhecido, há poucos estudos sobre como se comporta a evolução temporal de *excitações* nesse sistema. Desta forma, o objetivo central deste projeto é obter a propagação com o tempo das componentes de um

spinor de quatro componentes Ψ dado por:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_{E\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{H\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{E\downarrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{H\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

através da Equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{BHZ}} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.11)$$

Utilizaremos condições iniciais tais que cada componente $\psi_{i=E,H;\sigma}$ do spinor em $t = 0$ é uma gaussiana centrada em $\mathbf{r}_0$ e com momento inicial $\mathbf{k}_0$ dado por:

$$\psi_{i;\sigma}(\mathbf{r}, t = 0) = C_\sigma \cdot e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}{2L^2}}, \quad (1.12)$$

onde C_σ são constantes de normalização. Escolhendo as condições iniciais, podemos escolher o tipo de “pacote” inicial: “tipo elétron” ou “tipo buraco”, com ou sem polarização de spin.

Para se obter a evolução temporal, utilizou-se inicialmente métodos numéricos baseados em uma formulação do tipo *diferenças finitas* aliada a uma discretização no tempo. Um método que se mostrou eficiente, ao menos para evolução temporal de sistemas regidos pela equação usual de Schrödinger para sistemas 1D e 2D, é o chamado método “Leapfrog”, em que a parte imaginária e real da função de onda são evoluídas em estágios diferentes. No entanto, assim como relatado na Cap.2, concluímos que métodos do tipo Runge-Kutta possuem eficiência semelhante à do Leapfrog e com a vantagem de não precisarmos separar as partes real e imaginária das funções de onda. Contudo, como também relatado no Cap.2, decidimos prosseguir utilizando um terceiro método. Esse último método é baseado na aplicação do operador de evolução temporal combinado com transformadas de Fourier para se evitar a utilização de aproximações de derivadas.

No primeiro ano do projeto, nossos esforços se direcionaram na busca por um método numérico para integrar a equação (1.11) escrita para sistemas submetidos a um Hamiltoniano que considerasse a Interação Spin-Órbita devido à interação tipo Rashba. Esse estudo foi realizado com o intuito de se testar os algoritmos em um sistema para o qual há maior número de trabalhos publicados e, dessa forma, maiores fontes de comparação. Utilizamos como protótipos as equações para um pacote de onda livre sujeito à equação de Schrödinger, primeiramente sem acoplamento spin-órbita e posteriormente com acoplamento do tipo Rashba (capítulo 3).

1.4 Visão geral do trabalho

Capítulo 2

O segundo capítulo contém um relato de como o método numérico utilizado em grande parte desse trabalho, o chamado método *Fourier-Split*, foi escolhido. Nessa parte do trabalho as dificuldades encontradas para implementar um “integrador” da equação de Schrödinger para os sistemas físicos de interesse são enumeradas e discutidas. O fato de que os sistemas com acoplamento Spin-Órbita de Rashba e os isolantes topológicos 2D regidos pelo Hamiltoniano BHZ, serem descritos por Hamiltonianos com termos lineares em $\hat{p}$ se mostrou como uma das fontes desses problemas.

Capítulo 3

No terceiro capítulo é apresentada uma introdução à Interação Spin-Órbita de Rashba em semicondutores com uma são discutidos os resultados obtidos para os sistemas com acoplamento spin-órbita de Rashba.

Capítulo 4

No quarto capítulo os resultados obtidos para as simulações da dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos são apresentados. Nesse capítulo discute-se o comportamento anômalo dos valores médios obtidos numericamente para $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ em sistemas sem *borda*. Também é analisada a evolução temporal de excitações em “tiras” de largura finita de modo que seja possível observar estados de borda (*edge-states*).

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas futuras são apresentadas nesse último capítulo. A ideia é que após a obtenção dos resultados aqui possa servir como ponto de partida para projetos e publicações futuras.

Capítulo 2

Método Numérico

Durante todo o trabalho, usou-se o ferramental computacional como principal meio de estudo da evolução temporal dos sistemas de interesse. Inicialmente, os esforços foram direcionados à escolha do método numérico a ser utilizado. Nesse capítulo temos um relato de como foi feita essa escolha.

De início, nosso interesse era o de um método que evoluísse iterativamente a função de onda diretamente no espaço de posições. Isto nos levou a estudar métodos numéricos que pudessem ser utilizados para solucionar as equações diferenciais que regem os sistemas físicos estudados. A principal motivação para essa escolha foi a liberdade de estudar situações em que a geometria dos potenciais envolvidos fosse tão complicada quanto fosse possível modelar computacionalmente.

Em seguida adotamos uma estratégia diferente, onde utilizou-se as transformadas de Fourier e trabalhou-se no espaço dos momentos. Dessa forma, passamos a abdicar da versatilidade na geometria dos limites do sistema, uma vez que esses métodos exigem a presença de certas simetrias. No entanto, com essa nova escolha, veremos que os custos de computação são reduzidos, problemas de instabilidades são evitados e erros numéricos são minimizados.

Para fins de comparação entre os métodos numéricos, usamos o problema de uma partícula livre como base. Nesse problema, usou-se como condição inicial uma função de onda dada por um pacote de ondas gaussiano. Como esse problema de evolução temporal possui solução analítica exata e bem conhecida, pode-se com segurança avaliar o erro cometido ao assumir uma solução obtida numericamente.

2.1 Método Leapfrog

O objetivo principal do trabalho é estudar a evolução temporal de sistemas regidos pelo Hamiltoniano BHZ, sendo assim, precisamos de um meio de solucionar a equação de Schrödinger dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{BHZ} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.1)$$

O trabalho inicial para a escolha do método numérico começa com a avaliação do chamado método *Leapfrog*. O método Leapfrog consiste em resolver de forma separada as partes real e imaginária da equação de Schrödinger, tendo em vista que a função de onda ψ é uma função complexa [13]. Assim, pode-se escrever a função de onda na forma:

$$\psi(x, t) = R(x, t) + iI(x, t) \quad (2.2)$$

Substituindo a expressão (2.2) na equação de Schrödinger unidimensional, temos:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} [R(x, t) + iI(x, t)] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [R(x, t) + iI(x, t)] \\ &= \hbar \frac{\partial}{\partial t} [iR(x, t) - I(x, t)] \end{aligned} \quad (2.3)$$

Desta forma:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} I(x, t) \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right\} R(x, t) \quad (2.5)$$

Utilizamos daqui em diante a convenção onde $\hbar$ e m são ambos iguais a 1. Utilizou-se diferenças finitas para representar as derivadas com relação às coordenadas x e t , de maneira que os tempos nos quais partes real e imaginária da função de onda são deslocados de $\delta/2$, usando os índices m e n para representar as coordenadas espacial e temporal na “rede”, respectivamente, temos que as derivadas podem ser aproximadas pelas expressões de (2.6) a (2.9).

$$\frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{R_{m+1,n} - 2R_{m,n} + R_{m-1,n}}{(\delta x)^2} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial R(x, t)}{\partial t} \approx \frac{R_{m,n+1} - R_{m,n}}{\delta t} \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{I_{m+1,n} - 2I_{m,n} + I_{m-1,n}}{(\delta x)^2} \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial I(x, t)}{\partial t} \approx \frac{I_{m,n+1/2} - I_{m,n-1/2}}{\delta t} \quad (2.9)$$

Substituindo essas expressões nas equações diferenciais para R e I e rearranjando os termos de forma apropriada, temos as relações de recorrência (2.10) e (2.11). Sendo, assim, a solução da equação de Schrödinger dada por (2.12).

$$R_{m,n+1} = R_{m,n} - \frac{\delta t}{2(\delta x)^2} [I_{m+1,n+1/2} - 2I_{m,n+1/2} + I_{m-1,n+1/2}] - (\delta t)V_m I_{m,n+1/2} \quad (2.10)$$

$$I_{m,n+1/2} = I_{m,n-1/2} + \frac{\delta t}{2(\delta x)^2} [R_{m+1,n} - 2R_{m,n} + R_{m-1,n}] - (\delta t)V_m R_{m,n} \quad (2.11)$$

$$\psi_{m,n} = R_{m,n} + I_{m,n-1/2} \quad (2.12)$$

2.2 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são amplamente utilizados na resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDO's) de primeira ordem, como pode ser visto em [13, 14]. A popularidade desse método vem do fato de que equações diferenciais ordinárias que possuem derivadas de ordens superiores podem ser decompostas em um sistema de EDO's de primeira ordem acopladas. Genericamente, vamos considerar um sistema de N equações diferenciais de primeira ordem para as funções y_m , onde $m = 1, 2, 3, \dots, N$,

$$\frac{dy^{(p)}(t)}{dt} = f^{(m)}(t, y^{(1)}, \dots, y^{(M)}) \quad (2.13)$$

onde as funções f_m , no lado direito da equação, são conhecidas como funções incremento.

A opção mais imediata para solucionar numericamente tais equações é o chamado método de Euler, no qual após a discretização da variável “ t ” em passo inteiros de um incremento “ Δt ” temos

$$y_{n+1}^{(m)} = y_n + \Delta t f^{(m)}(t, y^{(1)}, \dots, y^{(M)}). \quad (2.14)$$

No caso da equação de Schrödinger 1D para uma partícula submetida a um potencial $V(x)$ temos $y_n^{(m)} \equiv \psi(x_m, t_n)$ e a função incremento fica

$$f^{(m)}(\psi(x_m, t_n)) = i \frac{1}{2} \nabla^2 \psi(x_m, t_n) - i V(x_m, t_n) \psi(x_m, t_n). \quad (2.15)$$

Até que se diga o contrário, as unidades adotadas são tais que $\hbar = 1$ e “massa da partícula” = 1. Note que no caso da solução da eq. de Schrödinger, para cada valor de x_m temos que evoluir uma função que depende somente de t_n . É como se estivéssemos resolvendo um sistema de EDO's, onde as amplitudes de probabilidade de cada ponto x_m são as soluções desejadas e todas as funções incremento são iguais. Ao discretizar a função incremento temos que a evolução temporal, ou seja, a evolução do índice n de ψ_n^m , onde $\psi_n^m \equiv \psi(x_m, t_n)$, fica dada por

$$\psi_{n+1}^m = \psi_n^m + i \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\psi_n^{m+1} - 2\psi_n^m + \psi_n^{m-1}}{\Delta x^2} \right) - i \Delta t V_n^m \psi_n^m \quad (2.16)$$

No entanto, tal procedimento não preserva a unitariedade, ou seja, não há conservação de probabilidade na evolução do pacote de ondas. O método *Leapfrog* corrige razoavelmente essa dificuldade. Esse método é o conhecido *método de Euler* e tem uma relação próxima com os métodos de *Runge-Kutta*.

2.2.1 Runge-Kutta de segunda ordem

O processo de resolução de EDO's por meio do método Runge-Kutta possui um passo intermediário quando comparamos com o método de Euler. No caso mais geral em que se deseja integrar um sistema de EDO's com N equações para $y^{(i)}$ em que $i = 1, 2, \dots, N$ teremos

$$k_1^{(i)} = \Delta t f^{(i)}(t_n, y_n^{(1)}, \dots, y_n^{(N)}) \quad (2.17)$$

$$k_2^{(i)} = \Delta t f^{(i)} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, y_n^{(1)} + \frac{k_1^{(1)}}{2}, \dots, y_n^{(N)} + \frac{k_1^{(N)}}{2} \right) \quad (2.18)$$

$$y_{n+1}^{(i)} = y_n^{(i)} + k_2^{(i)}. \quad (2.19)$$

2.2.2 Runge-Kutta de terceira ordem

O método descrito anteriormente (RK2) possui erro numérico da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Esse erro pode ser diminuído para um que seja da ordem $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Isso é possível se pagarmos o preço de mais um passo intermediário no cálculo para o avanço de Δt . O Método de Runge-Kutta de terceira ordem segue os procedimentos anteriormente descritos por (2.17) e (2.18) e o passo adicional dado em (2.20) para a evolução temporal, que nesse caso é dada por (2.21)

$$k_3^{(i)} = \Delta t f^{(i)}(t_n + \Delta t, y_n^{(1)} + 2k_2^{(1)} - k_1^{(1)}, \dots, y_n^{(N)} + 2k_2^{(N)} - k_1^{(N)}) \quad (2.20)$$

$$y_{n+1}^{(i)} = y_n^{(i)} + \frac{1}{6}(k_1^{(i)} + 4k_2^{(i)} + k_3^{(i)}). \quad (2.21)$$

2.2.3 Runge-Kutta de quarta ordem

O método que possui erro numérico da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ mais conhecido é o chamado Runge-Kutta de quarta ordem (RK4). Esse método também foi avaliado como candidato a gerar a evolução temporal de pacotes de onda gaussianos. Nesse método comparecem, além dos termos dados por (2.17) e (2.18), os termos

$$k_3^{(i)} = \Delta t f^{(i)}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, y_n^{(1)} + \frac{k_2^{(1)}}{2}, \dots, y_n^{(N)} + \frac{k_2^{(N)}}{2}\right) \quad (2.22)$$

e

$$k_4^{(i)} = \Delta t f^{(i)}(t_n + \Delta t, y_n^{(1)} + k_3^{(1)}, \dots, y_n^{(N)} + k_3^{(N)}). \quad (2.23)$$

De maneira que a evolução temporal fica determinada por

$$y_{n+1}^{(i)} = y_n^{(i)} + \frac{1}{6}(k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}). \quad (2.24)$$

2.3 Resultados para os Métodos de Runge-Kutta

No estudo realizado, avaliou-se o comportamento dos resultados numéricos quando comparados à solução analítica, bem conhecida, do problema de um pacote de ondas gaussiano evoluindo temporalmente sem a presença de um potencial. Para esse fim, observou-se o comportamento do módulo da diferença de probabilidade de se encontrar a partícula dentro dos limites do sistema. Essa quantidade foi chamada simplesmente como “**erro**” e foi definida por

$$\text{erro}(t) = \int_{x_i}^{x_f} \left| |\Psi_n(x, t)|^2 - |\Psi_a(x, t)|^2 \right| dx. \quad (2.25)$$

Todavia cabe ressaltar que a quantidade definida em (2.25) é diferente do *erro local* cometido pelos dos métodos numéricos.

A fim de avaliarmos qual dos métodos numéricos seria o mais apropriado para a evolução temporal comparamos os *erros* obtidos ao utilizarmos cada um desses métodos. Os métodos avaliados foram: *Leapfrog*, *Runge-Kutta* de segunda, terceira e quarta ordem (LF, RK2, RK3 e RK4 respectivamente). As simulações que geraram os resultados apresentados na Fig. (2.1a) foram executadas assumindo unidades em que $\hbar \equiv 1$ e $m_e \equiv 1$, e com uma discretização espacial e temporal dadas por $dx = 0.2$ e $dt = 0.005$ nessas unidades. A condição inicial adotada foi a de um pacote gaussiano definido por

$$\psi(x, 0) = A e^{ik_0 x} e^{-x^2/\sigma^2}, \quad (2.26)$$

onde

$$A = \left(\frac{2}{\pi \sigma^2} \right)^{1/4} \quad (2.27)$$

é a constante de normalização, onde $k_0 = 2$ e $\sigma = 2$ designam momento médio e largura do pacote de ondas respectivamente.

Vemos, pelos resultados apresentados na Fig. (2.1a), que todos os métodos apresentados geram erros muito próximos para a configuração específica descrita. Com o intuito de testar a estabilidade do método RK4 (método esse que sofre menos a influência da discretização temporal), foram executadas simulações com discretizações espaciais diferentes. O gráfico da Fig.(2.1b) mostra o erro obtido para uma simulação de evolução temporal utilizando RK4 em que os incrementos espacial e temporal foram escolhidos, respectivamente, como $dx = 0.01$ e $dt = 0.005$.

O que vemos na Fig.(2.1b) é uma evidente instabilidade do método, pois quando se diminui o espaçamento entre os pontos da *rede* espacial, sem que haja uma alteração no espaçamento temporal, perde-se completamente a normalização da função de onda obtida numericamente. No entanto, os métodos de Runge-Kutta são interessantes para nosso objetivo final, dado que a de evolução temporal obtida possui a vantagem de ter uma forma direta, ou seja, a obtenção da função de onda num instante depende somente de estados da função de onda definidos em instantes anteriores ao desejado.

Figura 2.1: (a) Evolução do erro com o tempo para os métodos de Runge-Kutta de segunda, terceira e quarta ordem (**RK2**, **RK3** e **RK4** respectivamente) e do método Leapfrog (**LF**). Para as simulações foram definidos os seguintes valores: $dx = 0.2$, $\sigma = 2$ e $k_0 = 2$. (b) Erro obtido da simulação com o método Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) para um passo de discretização espacial bem menor dado por $dx = 0.01$. Nota-se que neste caso específico temos uma instabilidade que destrói qualquer semelhança entre os resultados numéricos e analíticos.).

2.4 Métodos de Runge-Kutta com passo Adaptativo

A fim de corrigir as instabilidades que surgem ao alterarmos o tamanho do espaçamento entre os pontos no espaço, estudou-se a aplicação de métodos com passo temporal adaptativo. Com essa estratégia busca-se um algoritmo que regule automaticamente o tamanho do passo temporal da evolução quando um determinado parâmetro excede uma tolerância especificada. O parâmetro utilizado nesse controle não pode depender de uma solução analítica para a evolução temporal pois o intuito é utilizar esse método em problemas em que a solução analítica não é de fácil obtenção.

Apresentaremos aqui os resultados obtidos por um dos métodos do tipo *embedded Runge-Kutta*. Esses métodos utilizam-se do fato de que, para o procedimento de Runge-Kutta de ordem $M \geq 4$ são necessários mais do que M , mas não mais do que $M + 2$, cálculos intermediários. A ideia, portanto, é utilizar $M + 2$ cálculos intermediários para um procedimento de Runge-Kutta de ordem M e, ao mesmo tempo, para outro de ordem $M + 1$. A diferença entre as duas aproximações de $y(t + \Delta t)$ é usada como uma estimativa para o erro de truncamento que, por sua vez, pode ser usado como parâmetro de controle para a adaptação do passo.

O método aqui proposto, como uma solução ao problema de estabilidade do método de Runge-Kutta usual, é o chamado método Runge-Kutta *Embedded* de Cash-Karp (RKCK) [14]. Para melhor apresentar o procedimento, os coeficientes que aparecem nas fórmulas (2.28), (2.30) e (2.29) estão dispostos na tabela (2.1).

Tabela 2.1: Coeficientes para o método Runge-Kutta *Embedded* de Cash-Karp

i	a_i	b_{ij}					c_i	c_i^*
1							$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{55296}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		0	$\frac{277}{14336}$
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110562}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{512}{1771}$	$\frac{1}{4}$
$j =$		1	2	3	4	5		

$$\begin{aligned}
k_1^{(m)} &= \Delta t f^{(m)}(t_n, \vec{y}_n) \\
k_2^{(m)} &= \Delta t f^{(m)}(t_n + a_2 \Delta t, \vec{y}_n + b_{21} \vec{k}_1) \\
&\dots \\
k_6^{(m)} &= \Delta t f^{(m)}(t_n + a_6 \Delta t, \vec{y}_n + b_{61} \vec{k}_1 + b_{62} \vec{k}_2 + b_{63} \vec{k}_3 + b_{64} \vec{k}_4 + b_{65} \vec{k}_5)
\end{aligned} \tag{2.28}$$

$$y_{n+1}^{(m)} = y_n^{(m)} + c_1 k_1^{(m)} + c_2 k_2^{(m)} + c_3 k_3^{(m)} + c_4 k_4^{(m)} + c_5 k_5^{(m)} + c_6 k_6^{(m)} + O(\Delta t^6) \tag{2.29}$$

$$y_{n+1}^{(m)*} = y_n^{(m)} + c_1^* k_1^{(m)} + c_2^* k_2^{(m)} + c_3^* k_3^{(m)} + c_4^* k_4^{(m)} + c_5^* k_5^{(m)} + c_6^* k_6^{(m)} + O(\Delta t^5) \tag{2.30}$$

Dessa forma, o erro de truncamento pode ser aproximado por (2.31). Mais especificamente, cada uma das N componentes do vetor $\vec{\epsilon}$ é uma aproximação do erro de truncamento de uma das N respectivas soluções do sistema de equações diferenciais dado em (2.13).

$$\vec{\epsilon} = \vec{y}_{n+1} - \vec{y}_{n+1}^* = \sum_{i=1}^6 (c_i - c_i^*) \vec{k}_i \quad (2.31)$$

Definiremos aqui a estimativa do erro de truncamento como sendo a componente de $\vec{\epsilon}$ com maior valor absoluto (ϵ) uma vez que, no caso em que estamos trabalhando, a tolerância terá o mesmo valor para todas as EDO's do sistemas. De acordo com as ordens de aproximação envolvidas nos resultados (2.29), (2.30) e (2.31), conclui-se que para um passo temporal Δt_1 o erro ϵ_1 obtido é proporcional à $(\Delta t_1)^5$ de maneira que se o passo Δt_0 que resultaria em um erro ϵ_0 é dado por

$$\Delta t_0 = \Delta t_1 \left| \frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} \right|^{1/5} \quad (2.32)$$

O que se faz na implementação desse método é usar ϵ_0 como nossa tolerância, assim o resultado obtido em (2.32) pode ser usado de duas maneiras. Caso $\epsilon_1 > \epsilon_0$, o resultado de (2.32) nos diz o quanto devemos diminuir nosso passo temporal para que seja feita uma nova tentativa que substitua a evolução temporal que excedeu o limite imposto pela tolerância. Se, pelo contrário, tivermos $\epsilon_1 < \epsilon_0$, o resultado de (2.32) nos diz o quanto podemos aumentar o nosso passo temporal, para a próxima iteração, sem com isso ultrapassarmos a tolerância.

Para avaliarmos a estabilidade do método RKCK foi analisado o comportamento do erro, definido por (2.25), em função do espaçamento da rede espacial Δx . Os resultados de quatro simulações com diferentes valores de Δx estão mostrados no gráfico da Fig. (2.2a). Nessas simulações estamos utilizando os mesmos parâmetros utilizados nas simulações dos métodos Runge-Kutta usuais, a saber $k_0 = 2$ e $\sigma = 2$. Inicialmente, o passo temporal utilizado é de $\Delta t_1 = 0.005$ e a tolerância imposta para essas simulações foi de $\epsilon_0 = 10^{-12}$.

O que vemos no gráfico da figura (2.2a) é que, diferentemente dos métodos RK usuais, a alteração na rede espacial não causa instabilidades durante o intervalo de tempo coberto pela simulação. Também notamos, como o esperado, uma visível dependência do erro com o valor de Δx . Outro aspecto verificado foi a dependência do erro com os parâmetros k_0 e σ . Como pode ser notado pelo gráfico da figura (2.2b), os valores de k_0 e σ influem, principalmente, no valor máximo do erro e o quão rápido esse máximo é alcançado.

Figura 2.2: (a) Evolução temporal dos erros obtidos para o método Runge-Kutta adaptativo de quarta-quinta ordem com coeficientes de Cash-Karp (RKCK45). Nas quatro simulações utilizou-se as discretizações apresentadas. (a) Comparação entre os erros obtidos quando os parâmetros σ e k_0 da condição inicial são variados nas simulações usando o método RKCP45 e com $dx = 0.2$.

2.5 Limitação do método de Diferenças Finitas

Até aqui temos investido nossos esforços no desenvolvimento de simulações que façam uso do que é conhecido na literatura como *Finite Difference Time Domain Technique* (FDTD) [15]. Tradicionalmente utilizada na abordagem numérica das equações de Maxwell do eletromagnetismo, a FDTD pode ser facilmente adaptada para a equação de Schrödinger. Porém, como visto nas seções precedentes, a estabilidade numérica das soluções depende fortemente da separação dos sítios da rede discreta espacial (Δx e Δy) e do incremento temporal (Δt).

Uma análise cuidadosa a esse respeito é feita em [15]. Nessa análise é estudado o caso de um sistema tridimensional submetido a equação de Schrödinger na presença de um potencial V . De acordo com esse trabalho, o valor do incremento temporal para o qual ainda teríamos um algoritmo estável é dado por

$$\Delta t \leq \frac{\hbar}{\frac{\hbar^2}{m} \left[\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right] + V}. \quad (2.33)$$

Ou seja, temos um valor crítico para o incremento no tempo “ $\Delta t_{critical}$ ” que é dado pelo lado direito da equação (2.33).

De maneira trivial é possível adaptar a expressão dada em (2.33) para o casos de interesse

desse trabalho. Para o caso bidimensional sem a presença de um potencial teremos

$$\Delta t \leq \frac{m}{\hbar} \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2}, \quad (2.34)$$

e no caso unidimensional

$$\Delta t \leq \frac{m}{\hbar} \Delta x^2. \quad (2.35)$$

Foi possível verificar que, quando a condição (2.35) é respeitada, o gráfico de *erro*, definido por (2.25), não apresenta a instabilidade apresentada no gráfico da Fig. (2.1b) independentemente da escolha do valor de Δx .

2.6 Fourier Split

Dado um sistema cujo Hamiltoniano é dado por $\hat{H}$ e o estado inicial do sistema em questão (para um tempo igual à t_0) é descrito por $|\psi(t_0)\rangle$. O estado posterior do sistema ($|\psi(t)\rangle$) é dado pela aplicação do operador de evolução temporal $U(t, t_0)$. Define-se o operador de evolução temporal $U(t, t_0) = U(t - t_0)$ por

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

A ideia aqui é estudar a evolução de sistemas onde é possível decompor o operador Hamiltoniano em duas partes, uma dependente somente de momentos, que denotaremos por $\hat{T}(\mathbf{p})$ em referência ao termo de energia de cinética, e outra que depende somente das posições, que escreveremos como $\hat{V}(\mathbf{x})$ em analogia ao termo de energia potencial do hamiltoniano. Dessa forma escreveremos o operador $\hat{H}$ como sendo

$$\hat{H} = \hat{T}(\mathbf{p}) + \hat{V}(\mathbf{r}). \quad (2.37)$$

Usando $t_0 = 0$ por conveniência, a expressão (2.36) pode ser reescrita como

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(\hat{T}+\hat{V})t/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (2.38)$$

Utilizando a expansão simétrica de Strang, temos

$$e^{\delta t(A+B)} \approx e^{\frac{\delta t}{2}A} e^{\delta tB} e^{\frac{\delta t}{2}A}. \quad (2.39)$$

Note que, de forma geral, a expressão (2.39) é uma aproximação de segunda ordem da exponencial, no entanto para operadores que comutam ($[A, B] = 0$) a aproximação torna-se uma identidade. Dito isso, a evolução temporal dada pela Eq.(2.38) pode ser aproximada por

$$|\psi(\delta t)\rangle \approx e^{\frac{\delta t}{2}\left(-\frac{i\hat{V}}{\hbar}\right)} e^{\delta t\left(-\frac{i\hat{T}}{\hbar}\right)} e^{\frac{\delta t}{2}\left(-\frac{i\hat{V}}{\hbar}\right)} |\psi(0)\rangle. \quad (2.40)$$

A fim de melhorar a notação, vamos escrever as exponenciais de $\hat{V}(\mathbf{r})$ e $\hat{T}(\mathbf{p})$ mostradas acima como sendo os operadores $\hat{U}_{\mathbf{r}}(t)$ e $\hat{U}_{\mathbf{p}}(t)$ respectivamente. Dessa forma, pode-se reescrever (2.40) como

$$|\psi(\Delta t)\rangle \approx \hat{U}_{\mathbf{r}}\left(\frac{\delta t}{2}\right) \hat{U}_{\mathbf{p}}(\delta t) \hat{U}_{\mathbf{r}}\left(\frac{\delta t}{2}\right) |\psi(0)\rangle. \quad (2.41)$$

A grande vantagem do método *Fourier-Split* surge dos passos intermediários entre a aplicação de sucessivos operadores de evolução ($\hat{U}_{\mathbf{r}}(\delta t/2)\hat{U}_{\mathbf{p}}(\delta t)\hat{U}_{\mathbf{r}}(\delta t/2)$). A saber, reduz-se drasticamente o custo de memória nos cálculo das exponenciais de operadores, transitando-se da representação no espaço de posições para a representação no espaço de momentos do ket de estado. Dessa maneira, sempre estaremos aptos a usar representações diagonais dos operadores.

2.6.1 Implementação Numérica

Para implementar essa estratégia numericamente, vamos seguir a seguinte rotina:

1. Definir parâmetros do sistema e condições iniciais;
2. Para evoluir o sistema em δt seguir o seguinte procedimento:
3. Evoluir por meio passo no espaço x : $\psi_n \longrightarrow e^{-i(\frac{\delta t}{2})\frac{V_n}{\hbar}} \psi_n$
4. Calcular a transformada de Fourier usando “FFT”: $\tilde{\psi}_n \longrightarrow \mathcal{F}\psi_n$
5. Evoluir por um passo inteiro no espaço k : $\tilde{\psi}_n \longrightarrow e^{-i\delta t(\frac{\hbar}{2m})k^2} \tilde{\psi}_n$
6. Calcular a transformada inversa de Fourier usando “IFFT”: $\psi_n \longrightarrow \mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi}_n$
7. Evoluir meio passo faltante no espaço x : $\psi_n \longrightarrow e^{-i(\frac{\delta t}{2})\frac{V_n}{\hbar}} \psi_n$
8. Repetir passo 2 até alcançar o tempo final desejado.

Compactamente temos que para cada δt devemos executar a seguinte cadeia de operações:

$$|\psi(\delta t)\rangle \approx \hat{U}_{\delta t/2}^{\mathbf{r}}(\mathcal{F}^{-1}(\hat{U}_{\delta t}^{\mathbf{p}}(\mathcal{F}(\hat{U}_{\delta t/2}^{\mathbf{r}}|\psi(0)\rangle))))). \quad (2.42)$$

Onde $\mathcal{F}$ e $\mathcal{F}^{-1}$ representam o cálculo da transformada de Fourier e da sua inversa respectivamente. Os parênteses que aparecem na expressão acima são importantes dada a sequência de operações necessárias para a implementação correta do método. Notemos que, nesse procedimento, tiramos proveito de que podemos separar o operador hamiltoniano na forma $H = \hat{T}(\mathbf{k}) + \hat{V}(\mathbf{r})$, ou seja, de forma que coordenadas e componentes do momento linear não se misturam. Sistemas com campos magnéticos, por exemplo, não podem ser tratados dentro desta aproximação.

2.6.2 Pacote Gaussiano 1D

Como um teste da aplicação do método *Fourier-Split*, tratamos o problema de um pacote Gaussiano unidimensional. A condição inicial utilizada foi

$$\psi(x, 0) = A \exp \left\{ \frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} e^{ik_0 x} \right\}. \quad (2.43)$$

O problema de determinar a evolução temporal desse sistema é um clássico problema de mecânica quântica, e decidiu-se por esse sistema devido sua simplicidade e fato de possuir solução analítica exata. e é dada por

$$\psi(x, t) = A \sigma \frac{\exp \left(-\frac{\sigma^2 k_0^2}{2} + ik_0 x_0 \right)}{\sqrt{2 \left(\frac{\sigma^2}{2} + i \frac{\hbar t}{2m} \right)}} \exp \left\{ \frac{[\sigma^2 k_0 + i(x - x_0)]^2}{4 \left(\frac{\sigma^2}{2} + i \frac{\hbar t}{2m} \right)} \right\}. \quad (2.44)$$

Sem que haja qualquer prejuízo na evolução temporal, tomaremos a constante de normalização A igual à unidade. A comparação entre soluções analítica e numérica pode ser vista na Figura 2.3. Na figura, vê-se a evolução do pacote em quatro (4) instantes temporais diferentes, sendo a condição inicial definida em um desses instantes e dado por $t_0 = 0$ ps. Os gráficos em linha contínua foram obtidos numericamente e os pontos discretos são os valores assumidos pela expressão dada em (2.44). Vê-se, pela análise da Figura 2.3, uma concordância qualitativa da evolução dada pelo método Fourier-Split.

Foram usadas as constantes físicas tais que a coordenada espacial, sobre o eixo x , se encontra na unidade de nanômetro (nm) e os instantes de tempo em picossegundo (ps). Os parâmetros usados na simulação apresentada na Figura 2.3 foram: $\sigma = 30$ nm, $k_0 = m^*v/\hbar \approx 0.06$ nm⁻¹

Figura 2.3: Evolução temporal de um pacote de ondas gaussiano unidimensional via Fourier-Split. Os pontos discretos mostram os resultados obtidos analiticamente enquanto as curvas contínuas representam as soluções numéricas.

, onde $v = 100$ nm/ps é a velocidade do centro do pacote e m é a massa da partícula, que aqui foi tomada como sendo a massa efetiva do elétron na banda de condução do GaAs.

Os gráficos da Figura 2.4 permitem a comparação entre os erros obtidos utilizando os métodos de Fourier split e RKCK45, que apresentaram os melhores resultados em termos de propagação do erro numérico. Em ambos os gráficos temos a evolução do erro, definido pela expressão (2.25), devida a evolução de um pacote de ondas gaussiano com os mesmos parâmetros. No gráfico superior e em verde, temos o erro obtido por meio do método Runge-Kutta de ordem 4(5) com coeficientes de Cash-Karp. No gráfico inferior temos o erro do método de Fourier. Note que esse último tem um valor máximo do erro quase duas ordens de grandeza inferior ao primeiro método.

Figura 2.4: Comparação entre os erros (definido pela expressão (2.25)) obtidos utilizando os métodos de Fourier split e RKCK45, que apresentaram os melhores resultados em termos de propagação do erro numérico.

2.7 Considerações preliminares

No restante do trabalho, os principais resultados alcançados foram obtidos com a utilização do método *Fourier-Split* tendo em vista que esse método é mais estável quanto aos valores adotados para o espaçamento da rede espacial Δx_i e do incremento temporal Δt . Convém, no entanto, ressaltar que essa escolha acarreta em um prejuízo quanto à versatilidade das condições de contorno. Uma vez que o método Fourier-Split é baseado na utilização de transformadas de Fourier, e sabendo que essas pressupõem uma periodicidade da função transformada, a utilização de condições de contorno periódicas torna-se *quase* que mandatória.

Ao se trabalhar unicamente no espaço de posições, modelando operadores diferenciais por meio de diferenças finitas, temos acesso direto às condições de contorno podendo, assim, implementar aquela que melhor descreve o sistema físico de interesse. Por outro lado, se optarmos por um método baseado em diferenças finitas, como os métodos de Runge-Kutta, teremos que lidar com as dificuldades apresentadas na seção 2.5 acerca das instabilidades dependentes dos valores de Δx_i e Δt .

Mesmo com essa limitação, ainda é possível inserir limites do tipo barreiras infinitas (*hardwall*) formulação *mista*, isto é, adotando-se diferenças finitas ao longo da dimensão limitada pelas barreiras e Fourier-Split nas demais dimensões. Na seção 4.2.2 utilizamos esse método misto em um sistema isolante topológico com a forma de uma *fita* de largura L .

Outra questão importante é a consideração de sistemas com campos elétricos e magnéticos externos. Como mostrado na seção 2.6, o método Fourier-Split admite a presença de campos elétricos via potencial $V(\mathbf{r})$, a própria origem do nome do método está na separação (*split*) do operador Hamiltoniano em termos cinético e potencial. No entanto, a inserção de um potencial dependente da posição torna o método Fourier-Split uma aproximação cujo erro numérico vai com $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ enquanto que no procedimento RKCK45 o mesmo erro vai com $\mathcal{O}(\Delta t^5)$. Esse *erro*, vale ressaltar, é diferente daquele definido anteriormente nesse capítulo por meio de (2.25).

No entanto, é possível evitar o uso do *splitting* do Hamiltoniano usando um potencial vetor adequado $\mathbf{A}(t)$ e reformulando a dinâmica em termos do momento **cinético** $\mathbf{\Pi}$ ao invés do momento canônico $\mathbf{p}$. Fazendo-se a seguinte substituição no Hamiltoniano

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}(t) \quad (2.45)$$

pode-se evoluir o sistema inteiramente no espaço de momentos, como é exemplificado mais adiante na seção 3.4.7 no capítulo sobre sistemas com acoplamento de Rashba.

Assim, vamos explorar as vantagens do método Fourier-Split nos próximos capítulos para tratar o problema da dinâmica de excitações de carga em sistemas quânticos $1D$ e $2D$. No capítulo 3 apresentamos resultados desse método para sistemas com acoplamento spin-órbita de Rashba enquanto que no capítulo 4 apresentam-se os resultados obtidos para isolantes topológicos bidimensionais.

Capítulo 3

Acoplamento Spin-Órbita de Rashba

3.1 Acoplamento Spin-Órbita

Em 1921 os cientistas Otto Stern e Walther Gerlach, apresentaram os resultados do famoso experimento hoje conhecido por *experimento de Stern-Gerlach*. Um dos principais achados foi o de que, além de possuir carga elétrica e , o elétron possui um momento magnético intrínseco μ_S . Em alusão a um movimento de rotação em torno de seu próprio eixo, a esse momento magnético foi atribuído o nome de *momento magnético de spin*. De fato, hoje é bem estabelecido que o momento magnético medido por Stern-Gerlach é dado por

$$\mu_S = -\frac{e}{m}\mathbf{S}, \quad (3.1)$$

com a diferença de que, nesse caso, não há um *movimento* rotativo do elétron, apesar de podermos falar em um momento angular intrínseco acessível pelo operador $\hat{S}$ e que recebe o nome de momento angular de spin.

Dessa maneira, o Hamiltoniano de um elétron num campo magnético $\mathcal{B}$ deve conter o termo de interação magnética

$$\mathcal{H}_B = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathcal{B}. \quad (3.2)$$

Contudo, a existência do momento magnético de spin também possui efeitos em sistemas com $\mathbf{B} = 0$. Para se entender esses efeitos de maneira formal, deve-se considerar conjuntamente mecânica quântica e relatividade especial o que só pode ser feito por meio da utilização da equação de Dirac. O tratamento que se segue, portanto, é aproximado e, de certa forma, heurístico mas é suficientemente adequado para o que se deseja no restante do trabalho.

Consideremos um elétron se movendo num campo elétrico $\mathcal{E}$ produzido por um potencial elétrico $\phi(\mathbf{r})$ por meio de

$$\mathcal{E} = -\nabla\phi, \quad (3.3)$$

e sem a presença de um campo magnético. Considerando-se o referencial do elétron, tem-se efetivamente a presença de um campo magnético agindo no referencial em movimento. Dadas as equações de transformação dos campos

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}}_{\parallel} &= \mathcal{E}_{\parallel} \\ \bar{\mathcal{B}}_{\parallel} &= \mathcal{B}_{\parallel} \\ \bar{\mathcal{E}}_{\perp} &= \gamma(\mathcal{E}_{\perp} + \mathbf{v} \times \mathcal{B}) \\ \bar{\mathcal{B}}_{\perp} &= \gamma(\mathcal{B}_{\perp} - \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathcal{E}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde as quantidades com *barra* são medidas no referencial que se move com velocidade $\mathbf{v}$ em relação ao sistema fixo no “laboratório”, c é a velocidade da luz no vácuo e

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (3.5)$$

é o fator de Lorentz. As componentes dos campos paralelos e perpendiculares à direção da velocidade $\mathbf{v}$ são denotadas por $\mathcal{E}_{\parallel}$ e $\mathcal{E}_{\perp}$ respectivamente. Assumindo que o referencial do elétron é inercial e que $\gamma \approx 1$ (ou seja, $v \ll c$), o campo magnético “sentido” pelo elétron será dado por

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{B}} &\approx -\frac{1}{c^2}(\mathbf{v} \times \mathcal{E}) \\ &\approx \frac{1}{c^2}(\mathbf{v} \times \nabla\phi), \end{aligned} \quad (3.6)$$

de maneira que o termo de interação magnética, renomeado neste contexto como *interação spin-órbita*, fica dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SO} &= \frac{1}{c^2} \boldsymbol{\mu}_S \cdot (\mathbf{v} \times \nabla\phi) \\ &= -\frac{\hbar e}{2m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla\phi \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa o “vetor” composto pelas matrizes de Pauli, dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Como avisado no início dessa seção, essa derivação não foi realizada da maneira mais formal possível e, como resultado, não fornece o resultado correto para a interação spin-órbita. Na obtenção do resultado (3.7) usou-se o referencial que acompanha o elétron como se este fosse um referencial inercial e isso está incorreto, tendo em vista que o elétron é constantemente acelerado pelo campo $\mathcal{E}$.

Para corrigir o resultado obtido basta multiplicar (3.7) por um fator $1/2$, tal fator é proveniente de uma correção cinemática conhecida como *precessão de Thomas*. Essa correção leva em consideração as mudanças sucessivas de referenciais inerciais [16]. Como resultado final tem-se

$$\mathcal{H}_{SO} = -\frac{\hbar e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla \phi. \quad (3.9)$$

3.2 Hamiltoniano de Rashba

Com o resultado da seção anterior, o Hamiltoniano para elétrons se movendo em cristais com acoplamento spin-órbita é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) - \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

onde $V_0(\mathbf{r})$ é o potencial periódico devido à rede cristalina do material e $V(\mathbf{r})$ é simplesmente um potencial devido a uma fonte externa (e. g. um potencial de *gate*). Note-se que no termo de spin-órbita usou-se $e\phi(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r})$.

No entanto, no tratamento de sistemas nano/mesoscópicos o que geralmente se utiliza é uma formulação em termos de um Hamiltoniano efetivo. Para a obtenção de tal Hamiltoniano usa-se, dentre outras estratégias, o método perturbativo conhecido por método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Em sistemas bidimensionais, pode-se separar a influência do spin em duas “fontes” de acoplamento spin-órbita, ambas relacionadas a quebra de simetria de inversão. Em sólidos em que a estrutura cristalina não possui simetria de inversão (BIA, *bulk inversion asymmetry*) tem-se uma contribuição de spin-órbita conhecida como acoplamento de Dresselhaus que é dado, para sistemas 3D por

$$\mathcal{H}_D^{3D} = \frac{\gamma}{\hbar^3}((p_y^2 - p_z^2)p_x\sigma_x + (p_z^2 - p_x^2)p_y\sigma_y + (p_x^2 - p_y^2)p_z\sigma_z), \quad (3.11)$$

que para sistemas 2D, no caso em que a direção de crescimento é a direção- z paralela à $[001]$, o acoplamento de Dresselhaus (3.11) pode ser dividido em uma contribuição que depende linearmente com p_i e outra que possui dependência cúbica em p_i (onde $i = x, y$), ou seja:

$$\mathcal{H}_D^{2D} = \frac{\beta}{\hbar}(p_x\sigma_x - p_y\sigma_y) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(p_y^2p_x\sigma_x - p_x^2p_y\sigma_y). \quad (3.12)$$

Por outro lado, em sistemas obtidos por crescimento epitaxial pode-se criar um confinamento (e. g. *quantum well*) em que ocorra uma quebra da simetria de inversão espacial (SIA, *structure inversion asymmetry*). Tal quebra de simetria resulta na contribuição de spin-órbita devida a Rashba, que é dada por

$$\mathcal{H}_R = \frac{\alpha}{\hbar}(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x). \quad (3.13)$$

Na análise que se segue, focaremos na contribuição de Rashba. A importância dessa contribuição vem do fato de se poder ajustar a amplitude do acoplamento via aplicação de um potencial de *gate*. Tendo em vista que uma das motivações para o estudo de sistemas semicondutores com interação spin-órbita é o desenvolvimento de dispositivos, o controle sobre as propriedades do material é de grande interesse. No que se segue, portanto, chamaremos de Hamiltoniano Rashba a expressão dada por

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x). \quad (3.14)$$

Iniciando-se a análise do sistema Rashba, buscou-se conhecer, primeiramente, os autoestados e a relação de dispersão do sistema. Dessa forma, pode-se ver diretamente que $\mathcal{H}_R$ comuta com o operador de momento linear $\mathbf{p}$, de maneira que os autoestados podem ser postos na forma

$$|\psi\rangle = |\mathbf{k}\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (3.15)$$

onde $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ e $|\chi\rangle$ denota um spinor de duas componentes que aqui representa o grau de liberdade de spin. Para facilitar a análise, é útil escrever o vetor de onda da forma $\mathbf{k} = k(\cos \phi \hat{e}_x + \sin \phi \hat{e}_y)$. Desse modo, para um vetor de onda fixo, a matriz Hamiltoniana fica

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mathbb{1} + \alpha k \begin{bmatrix} 0 & \sin \phi + i \cos \phi \\ \sin \phi - i \cos \phi & 0 \end{bmatrix} \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \begin{bmatrix} 1 & -i\tilde{\alpha}e^{-i\phi} \\ i\tilde{\alpha}e^{i\phi} & 1 \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{3.16}$$

onde $\tilde{\alpha} = 2m\alpha/(\hbar^2 k)$.

Estamos interessados em resolver o problema de autovetores e autovalores de (3.16), ou seja, deseja-se resolver a equação

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}|\chi\rangle &= E|\chi\rangle \\
(\mathcal{H} - E)|\chi\rangle &= 0.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Figura 3.1: (a): Relação de dispersão de um sistema Rashba onde os paraboloides vermelho e azul são os gráficos para $E_+(\mathbf{k})$ e $E_-(\mathbf{k})$ respectivamente; (b): Para uma energia bem definida, os valores de vetor de onda $\mathbf{k}$ assumem valores sobre as circunferências dadas. As cores das circunferências correspondem às paraboloides apresentadas na fig. (a) e as setas indicam a orientação de spin dos autoespinores do Hamiltoniano Rashba.

Calculando o determinante da matriz obtida na segunda linha de (3.17) tem-se que a equação secular fica dada por

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right)^2 - (\alpha k)^2 = 0, \tag{3.18}$$

cuja solução nos dá a relação de dispersão do Hamiltoniano de Rashba

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha k. \quad (3.19)$$

Os autovetores correspondentes podem ser calculados sem grandes dificuldades substituindo a solução (3.19) na equação (3.17) e, a fim de melhor analisar as direções de spin, é interessante escrever os autovetores na forma

$$|\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{-i\phi/2} \\ \pm i e^{i\phi/2} \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Com o resultado da diagonalização (3.20) podemos calcular a orientação de spin $\hat{s}$ dos autoestados dados por $|\chi_{\pm}\rangle$, para isso basta calcular o valor esperado dos operadores de spin, que é equivalente a calcular os seguintes elementos de matriz

$$\langle \chi_{\pm} | \vec{\sigma} | \chi_{\pm} \rangle \equiv (\langle \chi_{\pm} | \sigma_x | \chi_{\pm} \rangle, \langle \chi_{\pm} | \sigma_y | \chi_{\pm} \rangle, \langle \chi_{\pm} | \sigma_z | \chi_{\pm} \rangle) = (\mp \sin \phi, \pm \cos \phi, 0). \quad (3.21)$$

Analisando os gráficos da figura (3.1), em especial o gráfico da figura (3.1a) podemos ver que existe um efeito de separação dependente de spin (*spin-splitting*) em sistemas com acoplamento Rashba. Vemos também que a relação de dispersão possui uma textura de spin dependente do momento, como fica bem representado na figura (3.1b). O comportamento que se observa na dinâmica de pacotes gaussianos em sistemas Rashba possuem sua origem nas propriedades dos autoestados do Hamiltoniano introduzidas nessa seção e serão de grande importância para a análise dos resultados obtidos.

3.3 Dinâmica de ondas planas em um sistema Rashba

3.3.1 Caso unidimensional

Iniciando o estudo da dinâmica, trataremos aqui de sistemas Rashba unidimensionais (1D). Nesse caso simplificado tem-se que a Hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} p_x \sigma_y, \quad (3.22)$$

dessa forma, vê-se que o Hamiltoniano comuta tanto com o operador momento p_x quanto com o operador de spin $S_y = (\hbar/2)\sigma_y$, de maneira que os autoestados de $\mathcal{H}$ podem ser expressos

Figura 3.2: Relação de dispersão de um sistema Rashba unidimensional em que a curva vermelha e azul são os gráficos para $E_+(\mathbf{k})$ e $E_-(\mathbf{k})$ respectivamente.

por autovetores (ou autoespinores) de σ_y multiplicados por ondas planas unidimensionais. Isso também pode ser visto se tomarmos $\phi = 0$ na expressão para os autovetores para o sistema bidimensional dada por (3.20). Explicitamente temos

$$|\chi_{\pm}^{1D}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ \mp i \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Nesse caso, teremos que nos preocupar apenas com a relação de dispersão dada pelo gráfico da função de $E(k_x)$ que pode ser obtido facilmente da equação (3.19) substituindo $k \rightarrow |k_x|$, ou seja

$$E_{\pm}(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \pm \alpha |k_x|. \quad (3.24)$$

Essa substituição é necessária pois em (3.19) a variável k representa a magnitude do vetor de onda e, portanto, é sempre positiva. A relação de dispersão também pode ser obtida da figura (3.1a) se tomarmos apenas o eixo “ k_x ” e desta forma teremos o gráfico dado em (3.2).

Dada a equação de movimento de Heisenberg

$$\frac{d\mathcal{O}_{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{O}_{(H)}, \mathcal{H}] + \left(\frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} \right)_{(H)} \quad (3.25)$$

onde por $\mathcal{O}_{(H)}$ denota-se o operador definido no formalismo de Heisenberg, ou seja

$$\mathcal{O}_H = U^\dagger(t, t_0) \mathcal{O} U(t, t_0), \quad (3.26)$$

denotamos por $\mathcal{O}$ o operador na formulação de Schrödinger e por $U(t, t_0) = e^{-i\mathcal{H}(t-t_0)/\hbar}$ o operador de evolução temporal. Todavia, é sempre possível pensar na equação de Heisenberg em termos de *valores esperados*, uma vez que estes não dependem do formalismo adotado, ou seja

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathcal{O}, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} \right\rangle. \quad (3.27)$$

Desta forma, daqui por diante vamos sempre relacionar valores esperados via equações de Heisenberg.

Começando a análise pela evolução da direção de spin, temos que

$$\frac{d}{dt} \sigma_x = \frac{2\alpha k_x}{\hbar} \sigma_z, \quad (3.28)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_y = 0, \quad (3.29)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_z = -\frac{2\alpha k_x}{\hbar} \sigma_x. \quad (3.30)$$

Podemos ainda organizar os resultados acima numa forma mais concisa

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{2\alpha k_x}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

ou, de maneira ainda mais simplificada, definindo $\tilde{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_z)$, podemos considerar a seguinte equação

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_z \end{pmatrix} = i\omega \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_z \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma} = i\omega \tau_y \tilde{\sigma}, \quad (3.33)$$

onde $\omega = 2\alpha k_x/\hbar$ e aqui usamos τ_y para denotar a matriz de Pauli que surge das manipulações com o intuito de não confundir com a notação utilizada para os operadores de spin.

Desta maneira, a solução da equação (3.32) é da forma

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}(t) &= e^{i\omega t\tau_y}\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 \\ &= \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t \\ -\sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 ,\end{aligned}\quad (3.34)$$

onde denotamos por $\boldsymbol{\sigma}_0$ o vetor com as as condições iniciais dos operadores $\hat{\sigma}$ (representação de Heisenberg). Assim podemos concluir que

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \begin{pmatrix} \sigma_0^x \cos \omega t + \sigma_0^z \sin \omega t \\ \sigma_0^y \\ -\sigma_0^x \sin \omega t + \sigma_0^z \cos \omega t \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

onde os termos σ_0^j são as componentes do vetor $\boldsymbol{\sigma}_0$.

Para o tratamento analítico de casos simples de evolução temporal, como o caso limite de ondas planas, os resultados a seguir são de grande utilidade:

$$[x_j, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_j}, \quad (3.36)$$

$$[p_j, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_j}, \quad (3.37)$$

em que $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3) \equiv (p_x, p_y, p_z)$ e onde F e G são funções que podem ser escritas como uma série de potências de p_j e de x_j respectivamente. Com o auxílio das igualdes (3.36) e (3.37), a equação de Heisenberg para o valor esperado da coordenada espacial x pode ser facilmente obtida e resulta em

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [x, \mathcal{H}] \rangle = \frac{1}{\hbar} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial k_x} \right\rangle \\ &= \frac{\hbar \langle k_x \rangle_t}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \langle \sigma_y \rangle_t ,\end{aligned}\quad (3.38)$$

onde, na segunda igualdade, fez-se uso do resultado dado por (3.36) e do fato de que podemos sempre decompor um sistema arbitrário em uma combinação de autoestados do sistema (ondas planas), para os quais tem-se que os valores de momento são dados por $\langle p_x \rangle = \hbar \langle k_x \rangle$ (caso 1D).

De acordo com a equação (3.29), tem-se que no caso unidimensional $\langle \sigma_y \rangle_t = \langle \sigma_y \rangle_0 \forall t$ de modo que o valor esperado $\langle x \rangle_t$ de uma distribuição de funções de onda plana, como uma distribuição gaussiana por exemplo, deve seguir a seguinte função

$$\langle x \rangle_t = \frac{\hbar \langle k_x \rangle_t}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \langle \sigma_y \rangle_0 t, \quad (3.39)$$

de modo que para um sistema sem potenciais e, dessa forma, com $\langle k_x \rangle_t = \langle k_x \rangle_0 \forall t$, pode-se escrever

$$\langle x \rangle(t) = \left\{ \frac{\hbar \langle k_x \rangle_0}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \langle \sigma_y \rangle_0 \right\} t, \quad (3.40)$$

no caso especial em que o pacote gaussiano possui $\langle k_x \rangle_0 = 0$ tem-se uma propagação que só depende do valor de $\langle \sigma_y \rangle_0$. Ou seja, tem-se uma dinâmica que depende do valor esperado para a medida da componente de spin na direção-“y” da condição inicial.

3.3.2 Caso bidimensional

Fazendo-se a mesma análise da evolução das componentes do operador de *spin* $\hat{S} = (\hbar/2)\hat{\sigma}$ para um sistema bidimensional, podemos escrever a nova versão da equação (3.31) como

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_x \\ 0 & 0 & \omega_y \\ -\omega_x & -\omega_y & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.41)$$

Tendo em vista que no caso bidimensional o vetor de onda tem duas componentes, define-se os ω 's da equação (3.41) como

$$\omega_j = \frac{2\alpha k_j}{\hbar}. \quad (3.42)$$

No caso particular de um sistema de uma solução do tipo onda plana com que se propaga na direção- x , ou seja, em que $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$, tem-se que o mesmo resultado obtido em (3.38) para $\langle x \rangle_t$ é válido e que a equação para $\langle y \rangle_t$ pode ser obtida de forma inteiramente análoga. Uma vez que $\langle k_y \rangle_t = \langle k_y \rangle_0 = 0$, temos que a equação para $\langle y \rangle_t$ é dada por

$$\frac{d}{dt} \langle y \rangle_t = -\frac{\alpha}{\hbar} \langle \sigma_x \rangle_t. \quad (3.43)$$

No caso em que não se tem campos externos e o vetor de onda é dado por $\mathbf{k} = k_0^x \hat{e}_x$, tem-se que $\omega_y \equiv 0$ e, dessa forma, conclui-se que $\langle \sigma_x \rangle_t$ fica definido pela primeira componente do resultado (3.35), ou seja

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \langle \sigma_x \rangle_0 \cos \omega_x t + \langle \sigma_z \rangle_0 \sin \omega_x t. \quad (3.44)$$

Considerando o caso em que o estado inicial do sistema é dado por

$$\psi(x, y) = \frac{\phi_{k_x}(x)}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

ou seja, um estado com os seguintes valores esperados: $\langle \sigma_x \rangle_0 = 1$ e $\langle \sigma_z \rangle_0 = 0$. De maneira que a expressão (3.44) fica reduzida a

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \langle \sigma_x \rangle_0 \cos \omega_x t. \quad (3.46)$$

Substituindo o resultado (3.46) em (3.43) e integrando a equação resultante tem-se a expressão para o valor esperado $\langle y \rangle_t$ de uma onda plana se propagando na direção- x

$$\langle y \rangle_t = \langle y \rangle_0 - \frac{\alpha \sin \omega_x t}{\hbar \omega_x} \langle \sigma_x \rangle_0. \quad (3.47)$$

Assim, com base no resultado (3.47), espera-se um comportamento oscilatório de $\langle y \rangle_t$ em sistemas com acoplamento Rashba mesmo na ausência da componente- y do momento linear. Da definição de ω_x conclui-se também que a frequência angular dessa oscilação é proporcional à magnitude do momento linear na direção x .

3.4 Dinâmica de Pacotes de Onda em sistemas Rashba

Após apresentar as soluções analíticas para o limite de ondas-planas, deseja-se aplicar os métodos numéricos discutidos no Cap. 2 para o caso de evolução temporal de pacotes de onda. Inicialmente, foi proposto a utilização de um método de *diferenças finitas*. Embora o método Runge-Kutta adaptativo (especificamente, RK45) tenha fornecido resultados consistentes com os resultados encontrados na literatura, o custo computacional e de implementação não se mostraram vantajosos. A seguir apresento o modo pelo qual os métodos Runge-Kutta foram implementados e alguns resultados obtidos para RK45.

3.4.1 O problema do Fermion Doubling

Sistemas com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba e isolantes topológicos possuem descrições teóricas muito semelhantes. Como veremos no capítulo 4, o Hamiltoniano com o termo de

Rashba e o Hamiltoniano utilizado para descrever poços quânticos de HgTe/CdTe podem ser postos na mesma estrutura matemática. Em especial, nota-se a existência de termos lineares com o operador momento $\hat{p}$.

No espaço de posições o operador momento é dado por um operador diferencial que, em 1D, fica dado por

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (3.48)$$

onde $\psi(x, t)$ é uma função de onda unidimensional sobre a qual o operador $\hat{p}$ atua. Para os objetivos desse trabalho, deseja-se uma versão discretizada de (3.48). Logo, pode-se pensar que qualquer uma das definições usuais de derivada discreta seja adequada para os propósitos desse trabalho. No entanto, isso não está correto.

Seja $\psi(x_m)$ uma função de onda unidimensional e discretizada numa rede em que o espaçamento dos pontos é dado por $x_{m+1} - x_m \equiv a$, as definições (usuais) de derivada discreta nos fornecem duas alternativas para o operador momento:

$$\hat{p}_{ns} |\psi\rangle \longrightarrow -i\hbar \frac{\psi(x_m + a) - \psi(x_m)}{a}, \quad (3.49)$$

e

$$\hat{p}_s |\psi\rangle \longrightarrow -i\hbar \frac{\psi(x_m + a) - \psi(x_m - a)}{2a}. \quad (3.50)$$

O problema do operador momento definido em (3.58), obtido da definição não-simétrica de derivada, fica evidente quando representamos a situação de forma matricial. Por meio da base $\{|x_i\rangle\}$, formada pelo conjunto de pontos da rede discreta, o estado $|\psi\rangle$ pode ser representado como um vetor coluna em que cada uma de suas componentes é o valor da função de onda $\psi(x_i)$, ou seja

$$|\psi\rangle := \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_M) \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Na mesma base, portanto, o operador $\hat{p}_{ns}$ fica representado pela matriz

$$\hat{p}_{ns} := -i\hbar \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}. \quad (3.52)$$

Nota-se que a matriz que representa $\hat{p}_{ns}$ não é auto-adjunta, de maneira que a definição (3.58) resulta num operador não-hermitiano. O mesmo não ocorre com a definição (3.50), tendo em vista que a representação matricial de $\hat{p}_s$ (“s” de simétrica) é dada por

$$\hat{p}_s := -i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

No entanto, essa formulação nos leva a um outro problema que é conhecido na literatura como problema de *Fermion Doubling* [17, 18, 19, 20]. Para entender esse problema convém fazer a transformada de Fourier discreta do operador $\hat{p}_s$ e ver como esse se apresenta no espaço dos momentos. Sendo a transformada de Fourier discreta de uma função $f(x_m)$ dada por

$$\tilde{f}(k_n) = \sum_{m=1}^M f(x_m) e^{-ik_n x_m}, \quad (3.54)$$

de maneira que, aplicando-se a transformada em (3.50) e após algumas manipulações algébricas, temos que a versão contínua da transformada de Fourier é substituída por

$$(\hbar k) \tilde{\psi}(k) \longrightarrow \left[\frac{\hbar}{a} \sin(k_n a) \right] \tilde{\psi}(k_n). \quad (3.55)$$

Fazer a transformada de Fourier de uma função de onda $\psi(x)$, equivale a mudar a representação do estado $|\psi\rangle$, antes expresso na base de posições $\{|x_i\rangle\}$, para a base de número de ondas $\{|k_i\rangle\}$. No caso contínuo, $\tilde{\psi}(k)$ é uma autofunção do operador momento com autovalor dado por $(\hbar k)$, já no caso discreto, o autovalor de $\hat{p}_s$ é dado por uma função senoidal.

Nota-se que no limite em que $k_n a \rightarrow 0$, os resultados contínuo e discreto coincidem por meio da aproximação $\sin(x) \approx x$. Porém, nos limites da zona de Brillouin, $k_n = -\pi/a$ e $k_n = \pi/a$, temos zeros adicionais não existentes na formulação contínua, como mostra o gráfico da Figura (3.3). De fato, existe mais uma gama de outros estados “duplicados” (com o mesmo

Figura 3.3: Dependência do autovalor do operador momento $\hat{p}$ com o número de onda k para os casos contínuo (Cont.) e discreto. Para fins de simplicidade, adotou-se $\hbar = 1$ e $a = 0.5$.

autovalor de $\hat{p}$) para além do intervalo $[-\pi/2a, \pi/2a]$. A presença desses estados *espúrios* é o que se denomina o problema de *Fermion Doubling*. Esse problema foi notado no contexto de teoria quântica de campos discretizada sobre uma rede, onde o interesse era a equação de Dirac para campos fermiônicos.

Buscando-se evitar a inclusão desses estados espúrios nas simulações numéricas com adoção de diferenças finitas, adotou-se a estratégia descrita nas referências [17] e [20] e denominada aqui como *discretização de Susskind*. Nesses trabalhos, dois fatos são apontados como os responsáveis pela perda de unitariedade do formalismo e pelo problema do fermion doubling. Esses fatos podem ser postos da seguinte forma: no cálculo de derivada discreta de primeira ordem, comete-se um dos seguintes erros:

- A derivada é calculada em pontos inexistentes da rede e diferentes de onde a função de onda é definida;
- O espaçamento utilizado para calcular a derivada é duas vezes maior que aquele que separa os sítios da rede.

Para entender como a discretização de Susskind soluciona os problemas enumerados, vejamos o exemplo simplificado em que se tem o problema de autovalores unidimensional da equação Dirac para uma partícula sem massa. A equação que se quer resolver é dada por

$$v\sigma_x \left\{ -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right\} = E\Psi, \quad (3.56)$$

onde v é a velocidade do fermion sem massa e σ_x é a matriz de Pauli. Assim como o caso do Hamiltoniano Rashba, Ψ é definido como um spinor de duas componentes

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi \\ \phi \end{bmatrix}. \quad (3.57)$$

No procedimento de Susskind a estratégia é definir cada componente do spinor Ψ em uma rede diferente, ambas com espaçamento a entre os sítios mas deslocadas entre si por $a/2$. Definindo, assim, a componente $\psi(x_n)$ nos pontos $x_n = n.a$ e $\phi(\tilde{x}_n)$ nos pontos $\tilde{x}_n = (n - 1/2)a$, onde $n = 1, 2, \dots, N$.

Desse modo, ao utilizarmos a definição do operador momento dado em (3.58) para ϕ e uma versão diferente do mesmo operador para ψ , definido por uma derivada assimétrica calculada “para trás”

$$\partial_x \psi(x) \longrightarrow \frac{\psi(x_n) - \psi(x_n - a)}{a}, \quad (3.58)$$

teremos ambos os lados calculados nos mesmos pontos e sem a necessidade de dobrar o espaçamento da rede no cálculo das derivadas. A equação (3.56) nesse esquema fica dada por

$$-\frac{iv\hbar}{a} \begin{bmatrix} \phi(x_n + \frac{a}{2}) - \phi(x_n - \frac{a}{2}) \\ \psi(x_n) - \psi(x_n - a) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi(x_n) \\ \phi(x_n - a/2) \end{bmatrix}, \quad (3.59)$$

onde vê-se que, apesar da componente ψ ser definida nos pontos $x_n \pm a$, a sua derivada, calculada à esquerda da eq. (3.59), é melhor aproximada nos pontos $x_n \pm \frac{a}{2}$, o inverso ocorrendo para a componente ϕ .

Existem outras soluções para o problema de fermion doubling, a escolha da discretização de Susskind foi motivada pela simplicidade da sua implementação que evita cálculos adicionais de médias em pontos vizinhos [18] ou modelos não-locais de derivada [19].

Participação do fermion doubling

Na próxima seção apresento a utilização o método de discretização de Susskind aplicado no contexto do Hamiltoniano termo de Rashba. No entanto, não ficou claro qual seria a participação do fermion doubling no contexto das simulações de evolução temporal.

Figura 3.4: Dependência do autovalor do operador momento ao quadrado $\hat{p}^2$ com o número de onda k para os casos contínuo (Cont.) e discreto. Para fins de simplicidade, adotou-se $\hbar = 1$ e $a = 0.5$.

A instabilidade dos métodos baseados em diferenças finitas, discutida na seção 2.5, foram observadas nas nossas primeiras simulações com acoplamento spin-órbita de Rashba e, inicialmente, surgiu a hipótese de que essa instabilidade fosse devida ao problema de fermion doubling. A mudança para o método Fourier-Split eliminou as instabilidades e a relevância de se preocupar com um ou outro esquema de discretização.

No entanto, ao se investigar canais com condições de contorno do tipo barreira infinita (*hardwall*) (vide seção 4.2.2), somos forçados a pensar novamente em versões discretizadas para o operador momento. Nesse caso, o que se observou é próximo do que se encontra descrito em [21] onde é apontado que a existência de termos quadráticos com o momento, no Hamiltoniano BHZ, podem eliminar os estados espúrios provenientes de termos lineares em p .

Seja aplicação de $\hat{p}_s^2$ sobre a função de onda $\psi(x_n)$ unidimensional dada por

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{a^2} [\psi(x_n + a) + \psi(x_n - a) - 2\psi(x_n)], \quad (3.60)$$

teremos que a transformada de Fourier das versões contínua e discreta se relacionam por

$$\hbar^2 k^2 \tilde{\psi}(k) \longrightarrow \frac{4\hbar^2}{a^2} \sin^2 \left(\frac{k_n a}{2} \right) \tilde{\psi}(k_n). \quad (3.61)$$

Como se pode notar do gráfico da Figura (3.4), a discretização desse termo não resulta em estados duplicados na zona de Brillouin, e a dependência desse termo com $1/a^2$ torna possível escolher uma discretização em que as consequências do fermion doubling apareçam para maiores valores de k . Durante o cálculo das estruturas de bandas apresentadas na seção 4.2.2, esse

feito pode ser notado, em que estados espúrios foram eliminados ao se diminuir suficientemente o valor do espaçamento da rede.

3.4.2 Diferenças Finitas *Runge-Kutta*

A equação que queremos resolver é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_T \Psi, \quad (3.62)$$

onde o Hamiltoniano total $\mathcal{H}_T$ é a soma do Hamiltoniano usual (energia cinética e potencial) com o termo de Rashba [22, 23, 24]. Colocando de forma explícita temos, para sistemas 2D

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi + \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{p}_x \hat{\sigma}_y - \hat{p}_y \hat{\sigma}_x) \Psi, \quad (3.63)$$

sendo Ψ definido como um spinor formado pelas amplitudes de probabilidade das componentes *spin-up* e *spin-down*, dessa forma, em um sistema 2D temos

$$\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x, y, t) \\ \psi_{\downarrow}(x, y, t) \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Separando a equação (3.63) em componentes e nos restringindo ao caso unidimensional (1D), chegamos ao seguinte sistema de equações diferenciais acopladas

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\uparrow}}{\partial x^2} + V \psi_{\uparrow} - i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \psi_{\downarrow}, \quad (3.65)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\downarrow}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\downarrow}}{\partial x^2} + V \psi_{\downarrow} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \psi_{\uparrow}. \quad (3.66)$$

Discretizando ambas as componentes de Ψ , utilizando a definição usual de derivadas de segunda ordem e utilizando-se a estratégia da discretização de Susskind [17, 20] para a implementação do termo de Rashba temos que, após algumas manipulações algébricas,

$$\begin{aligned} \psi_{m,n+1}^{\uparrow} = & \psi_{m,n}^{\uparrow} + i \frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left[\psi_{m+1,n}^{\uparrow} - 2\psi_{m,n}^{\uparrow} + \psi_{m-1,n}^{\uparrow} \right] \\ & - i \frac{\Delta t}{\hbar} V_m^{\uparrow} \psi_{m,n}^{\uparrow} + i \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\psi_{m,n}^{\downarrow} - \psi_{m-1,n}^{\downarrow} \right], \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} \psi_{m,n+1}^\downarrow = \psi_{m,n}^\downarrow + i \frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left[\psi_{m+1,n}^\downarrow - 2\psi_{m,n}^\downarrow + \psi_{m-1,n}^\downarrow \right] \\ - i \frac{\Delta t}{\hbar} V_m^\downarrow \psi_{m,n}^\downarrow - i\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\psi_{m+1,n}^\uparrow - \psi_{m,n}^\uparrow \right]. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Note que, devido à discretização de Susskind, as componentes do spinor são definidas em pontos diferentes do espaço. Dessa forma, cada uma das componentes deve ser submetida a uma função potencial discretizada de maneira diferente. A função potencial $V(x)$ deve ser “amostrada” nos mesmos pontos espaciais que as componentes correspondentes do spinor. Ou seja, sendo as componentes dadas por

$$\psi_m^\uparrow = \psi^\uparrow(x_m^\uparrow) = \psi^\uparrow(m\Delta x), \quad (3.69)$$

$$\psi_m^\downarrow = \psi^\downarrow(x_m^\downarrow) = \psi^\downarrow(m\Delta x + \Delta x/2), \quad (3.70)$$

então teremos as seguintes *amostragens* para a função potencial:

$$\begin{aligned} V_m^\uparrow &= V(x_m^\uparrow) = V(m\Delta x) \text{ e} \\ V_m^\downarrow &= V(x_m^\downarrow) = V(m\Delta x + \Delta/2). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Podemos ainda, reescrever as equações (3.65) e (3.66) em termos matriciais, de modo que o resultado seja uma equação diferencial do tipo

Figura 3.5: Diagrama representativo das dependências da evolução temporal de cada uma das componentes do spinor Ψ .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow \end{pmatrix} &= \vec{F}(\psi^\uparrow, \psi^\downarrow) \\ &= \begin{pmatrix} f_{up}(\psi^\uparrow, \psi^\downarrow) \\ f_{down}(\psi^\uparrow, \psi^\downarrow) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

de maneira que, nos termos apresentados na seção 2.2, as equações a serem utilizadas nos procedimentos de Runge-Kutta de quarta ordem serão compostas como se segue:

$$k_1^{up(down)} = \Delta t f^{up(down)}(\psi_n^\uparrow, \psi_n^\downarrow, t_n), \quad (3.73)$$

$$k_2^{up(down)} = \Delta t f^{up(down)}\left(\psi_n^\uparrow + \frac{k_1^{up}}{2}, \psi_n^\downarrow + \frac{k_1^{down}}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (3.74)$$

$$k_3^{up(down)} = \Delta t f^{up(down)}\left(\psi_n^\uparrow + \frac{k_2^{up}}{2}, \psi_n^\downarrow + \frac{k_2^{down}}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (3.75)$$

e

$$k_4^{up(down)} = \Delta t f^{up(down)}(\psi_n^\uparrow + k_3^{up}, \psi_n^\downarrow + k_3^{down}, t_n + \Delta t). \quad (3.76)$$

Nas expressões (3.73)-(3.76) não quisemos nos restringir aos casos em que as *funções incremento* f^{up} e f^{down} não possuem dependências temporais explícitas. Se o sistema em estudo for submetido a um potencial dependente do tempo, então $f^{up(down)}$ terão dependência explícita do tempo. Desse modo, o incremento temporal do sistema é dado por

$$\psi^{\uparrow(\downarrow)}(t_{n+1}) = \psi^{\uparrow(\downarrow)}(t_n) + \frac{1}{6} \left(k_1^{up(down)} + 2k_2^{up(down)} + 2k_3^{up(down)} + k_4^{up(down)} \right) \quad (3.77)$$

Dessa forma, temos o esboço para qualquer que seja o método de Runge-Kutta que se queira implementar, incluindo os métodos com passo adaptativo.

3.4.3 Resultados para a evolução temporal com Runge-Kutta de 4ª ordem

Nos gráficos da figura (3.6) vê-se a evolução de um sistema Rashba unidimensional. Para a obtenção de tal evolução usou-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Nos cálculos da simulação, as unidades de tempo e comprimento utilizadas foram tais que $\hbar \equiv 1$ (constante de Planck reduzida) e $m^* \equiv 1$ (massa efetiva do elétron). A condição inicial usada para o que está apresentado em (3.6) foi

Figura 3.6: Propagação de um pacote de ondas unidimensional com acoplamento *spin-órbita* de Rashba, obtido pelo algoritmo de Runge-Kutta de quarta-ordem com $dt/(dx)^2 = 1/4$. Os gráficos acima são referentes aos seguintes instantes: *a)* $t = 0$, *b)* $t = 668 \times \delta t$, *c)* $t = 1335 \times \delta t$, $\delta t = 0.0025$.

Figura 3.7: Relação de dispersão de um sistema Rashba unidimensional em que a curva vermelha e azul, neste caso, são os gráficos para os autoestados de spin $|s_y, +\rangle$ e $|s_y, -\rangle$ respectivamente. Perceba que as cores não são exatamente iguais àquelas do gráfico da fig. (3.2). Num mesmo ramo de energia há mudança de orientação de spin quando k_x muda de sinal.

$$\psi(x) = A e^{-(x-x_0)^2/2d^2} e^{-ik_0x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.78)$$

Ou seja, um pacote de ondas formado por uma distribuição Gaussiana no instante inicial t_0 onde A é simplesmente uma constante de normalização, d é a “largura” da distribuição (para ser mais preciso $d/\sqrt{2}$ é *desvio padrão* da distribuição de probabilidades dada por $\rho(x) = |\psi(x)|^2$) e $\langle k_x \rangle = k_0$ é o número de onda referente ao momento médio da condição inicial. Em cada um dos gráficos o que se observa é o gráfico da densidade de probabilidade dada por

$$|\psi(x)|^2 = (\psi_\uparrow^*(x), \psi_\downarrow^*(x)) \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(x) \\ \psi_\downarrow(x) \end{pmatrix} = |\psi_\uparrow(x)|^2 + |\psi_\downarrow(x)|^2, \quad (3.79)$$

onde usou-se a notação introduzida por (4.10).

Qualitativamente falando, os resultados apresentados em (3.6) mostram a formação de dois picos que evoluem com diferentes velocidades de grupo. Esse comportamento pode ser explicado por meio de uma análise do caso limite de ondas planas feito na seção 3.3.1.

Essa análise pode ser feita por meio da observação da relação de dispersão, dada na figura (3.2), e da dependência da orientação de spin com o *ramo* dessa mesma relação. Tomando-se as orientações de spin sobre o eixo k_x na figura (3.1b) ou, de forma equivalente, tomando-se $\phi = 0$

na expressão para o autoespinor (3.20) é possível verificar que, no caso 1D, os autoespinores para os ramos positivos da relação de dispersão são dados por $|+\rangle = |\uparrow_y\rangle$ e $|-\rangle = |\downarrow_y\rangle$. O espinor da condição inicial dada por (3.78), portanto, pode ser decomposto em

$$|\uparrow_z\rangle = \frac{(|\uparrow_y\rangle + |\downarrow_y\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad (3.80)$$

da mesma forma que o $|\downarrow_z\rangle$ pode ser escrito como

$$|\downarrow_z\rangle = -i \frac{(|\uparrow_y\rangle - |\downarrow_y\rangle)}{\sqrt{2}}. \quad (3.81)$$

Com isso, conclui-se que a condição inicial (3.78) possui contribuições de ambos os ramos da relação de dispersão e de igual amplitude. Dessa maneira, a formação de dois picos na função densidade de probabilidade, cada um dos picos com velocidades de grupo diferentes, tem sua origem na diferença entre as derivadas nos diferentes ramos, uma vez que a velocidade de grupo do pacote de onda é dado por

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{\partial E}{\partial k_x} \right|_{k_x = \langle k_x \rangle}. \quad (3.82)$$

3.4.4 Unidades Adotadas

Antes de se discutir os resultados do método *FS* (Fourier-Split), cabe ressaltar que para obter os resultados apresentados daqui para frente, utilizou-se os valores e as unidades apresentadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Unidades e valores adotados para as constantes físicas.

R	a_0	m^* (GaAs)	$\hbar$	$[\alpha_R]$	$[eE]$	$[L]$	$[T]$
13.60 eV	0.0529 nm	$0.067 m_0$	0.658 meVps	meVnm	meV/nm	nm	ps

Dito de outra forma, para as simulações apresentadas no restante do capítulo, usou-se a massa efetiva de elétrons (banda de condução) em Arseneto de Gálio (*GaAs*) dada por $m^* = 0.067 m_0$ onde m_0 é a massa do elétron livre. A escolha da unidade de $[\hbar] = \text{meV.ps}$ acaba por definir as unidades de comprimento e de tempo como sendo $[L] = \text{nm}$ e $[T] = \text{ps}$ respectivamente.

As quantidades denotadas na tabela por R e a_0 são a constante de *Rydberg* e o raio de *Bohr* respectivamente. Tais quantidades são utilizadas para escrever o fator multiplicativo da

contribuição cinética do Hamiltoniano, no contexto das simulações que se seguem. Ou seja, com o auxílio de “ R ” e “ a_0 ” pode-se escrever

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m^*} &= \frac{1}{0.067} \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \\ &= \frac{1}{0.067} (R a_0^2) . \end{aligned} \quad (3.83)$$

3.4.5 Resultados do método de Fourier 1D

Tendo em vista as vantagens do *Fourier-Split* (FS), tanto no que diz respeito a implementação quanto acurácia, todos os resultados apresentados a seguir foram obtidos por meio desse método. Inicialmente analisou-se um sistema unidimensional semelhante àquele estudado via métodos Runge-Kutta e descrito na seção 3.4.3. Assim, notou-se que para um sistema 1D com acoplamento spin-órbita de Rashba o método apresenta resultados condizentes com aqueles obtidos com os métodos RK, o que fica evidente ao se comparar os gráficos da Figura 3.6 com os da Figura 3.8.

Os resultados apresentados na Figura 3.8 foram alcançados por meio da condição inicial dada por

$$\psi(x) = A e^{-(x-x_0)^2/2d^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.84)$$

Ou seja, diferentemente da (3.78), que foi utilizada para se obter os gráficos da Figura 3.6, agora tem-se um estado “proporcional” à $|\uparrow_x\rangle$. Desse modo, pode-se justificar o surgimento dos mesmos dois picos na evolução temporal da densidade de probabilidade por meio decomposição de $|\uparrow_x\rangle$

$$|\uparrow_x\rangle = e^{-i\pi/4} \frac{(|\uparrow_y\rangle + i|\downarrow_y\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad (3.85)$$

do mesmo modo pode-se esperar o mesmo comportamento da condição inicial dada por uma função Gaussiana multiplicada por $|\downarrow_x\rangle$, uma vez que podemos escrever

$$|\downarrow_x\rangle = e^{+i\pi/4} \frac{(|\uparrow_y\rangle - i|\downarrow_y\rangle)}{\sqrt{2}}. \quad (3.86)$$

Dessa maneira, tem-se novamente uma distribuição simétrica da amplitude de probabilidade entre os ramos da relação de dispersão, o que origina os dois picos na evolução de $|\psi(x, t)|^2$.

Os gráficos da Figura 3.9, por outro lado, mostram a evolução da condição inicial dada por

$$\psi(x) = A e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix}, \quad (3.87)$$

como esperado, nesse caso não há formação dos picos observados anteriormente, uma vez que a condição inicial é composta somente por estados situados sobre o ramo “+” da relação de dispersão.

Outro ponto a ser notado é que tanto os resultados da Figura 3.8 quanto os da Figura 3.9 vêm de condições iniciais com a parte *orbital* da função de onda idênticas e com $\langle k_x \rangle = 0$. Assim, o fato de os resultados para o estado inicial proporcional à $|\uparrow_x\rangle$ serem simétricos pode ser facilmente explicado: Isso se deve à existência de dois ramos com diferentes orientações de spin, separados simetricamente com relação ao valor $k_x = 0$, como mostrado na Figura 3.7. O mesmo raciocínio vale para o caso em que o estado inicial é $\propto |\uparrow_y\rangle$, nesse caso temos que somente o ramo *vermelho* do gráfico da Figura 3.7 está “ocupado” e em $\langle k_x \rangle = 0$ a derivada (3.82) é não-nula e positiva.

3.4.6 Resultados do método de Fourier 2D

Como mencionado no início do capítulo, a falta de simetria de inversão da estrutural é a origem do acoplamento de Rashba. Dessa forma, o estudo do comportamento de um gás de elétrons bidimensional é de grande relevância já que é no contexto de poços quânticos e heterojunções que geralmente se realizam tais sistemas.

Novamente, a condição inicial é composta por uma distribuição Gaussiana multiplicada por um vetor bidimensional (ou espinor), ou seja

$$\psi(\mathbf{r}) = A \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}{2d^2} \right\} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (3.88)$$

onde $\mathbf{r} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y$ é a posição no plano perpendicular a direção de crescimento do poço ou da heterojunção. Os sistemas aqui analisados foram definidos sempre com uma gaussiana simétrica, ou seja, com valores iguais para as larguras nas direções x e y , sendo que tal informação é dada pelo valor de d na expressão (3.88). No caso 2D o momento médio inicial é dado pelo vetor $\mathbf{k}_0 = k_{x0}\hat{e}_x + k_{y0}\hat{e}_y$. E, posto de forma genérica, $c_\uparrow$ e $c_\downarrow$ são os coeficientes de expansão do espinor inicial, escrito na base de autoespinores de $\hat{S}_z$.

Figura 3.8: Evolução temporal do pacote Gaussiano unidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 100.0 \text{ meV nm}$. Os parâmetros da simulação foram: comprimento do sistema $L = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N_x = 2000$; largura do pacote $\sigma = 15 \text{ nm}$; número de onda médio $\bar{k}_x = 0$. A figura (3.8a) é a condição inicial, que é dada pelo autovetor de $\hat{S}_x$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$, multiplicado por uma função gaussiana. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.8b) $t = 0.1 \text{ ps}$, (3.8c) $t = 0.3 \text{ ps}$, (3.8d) $t = 0.5 \text{ ps}$.

Figura 3.9: Evolução temporal do pacote Gaussiano unidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0 \text{ meV nm}$. Os parâmetros da simulação foram: comprimento do sistema $L = 1000 \text{ nm}$; número de pontos $N = 2L$; “largura do pacote” $\sigma = 15 \text{ nm}$; número de onda médio $\bar{k}_x = 0$. A figura (3.9a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$, que é o autovetor “+” de $\hat{S}_y$, multiplicado por uma função gaussiana. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.9b) $t = 0.2 \text{ ps}$, (3.9c) $t = 0.4 \text{ ps}$, (3.9d) $t = 0.6 \text{ ps}$.

Nas figuras 3.10 e 3.11 apresentam-se os resultados de simulações para a evolução de sistemas com $\mathbf{k}_0 = 0$ enquanto que em 3.12 vê-se a evolução de um pacote de ondas com um $\mathbf{k}_0$ correspondente a uma velocidade média de $\langle v \rangle_0 = 500$ nm/ps para um pacote de ondas usual livre. Lembrando que, para um pacote livre de forças e sem acoplamento spin-órbita

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{\hbar \langle \mathbf{k} \rangle}{m^*}, \quad (3.89)$$

onde m^* é a massa efetiva característica do material por onde o pacote se propaga.

Para as três simulações apresentadas a seguir adotou-se um espaço 2D de dimensões $L_{x(y)} = 1000$ nm (vide discussão sobre as unidades feita na seção 3.4.4) dividido em uma rede discreta com 200×200 pontos. Se adotou, também para as três simulações, o valor $d = 20$ nm para a largura inicial (simétrica) da gaussiana.

Os gráficos da figura 3.10 mostram a evolução temporal do sistema bidimensional com o spin inicialmente orientado na direção “ x -positivo”. Dessa forma, na expressão dada por (3.88) temos

$$c_{\uparrow} = c_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (3.90)$$

Os resultados das figuras 3.11 e 3.12, por sua vez, referem-se ambas a uma condição inicial em que o spin encontra-se alinhado na direção de “ z -positivo”, de modo que

$$c_{\uparrow} = 1, \quad c_{\downarrow} = 0. \quad (3.91)$$

Nota-se, dos resultados da figura 3.10, uma propagação no sentido de “ y -negativo” que deve ser resultado unicamente do acoplamento de Rashba, tendo em vista que a condição inicial possui momento inicial médio nulo. Nota-se também que, mudando a orientação de spin da condição inicial de “ x -positivo” para “ z -positivo”, vemos a evolução do pacote de ondas passa a ser simétrica.

Novamente esse comportamento pode ser entendido por meio da estratégia usada no estudo de ondas planas. A ideia é escrever as equações de Heisenberg como foi feito na seção 3.3 e com isso explicar, mesmo que qualitativamente, o comportamento dos pacotes de onda 2D. Assim, as equações de movimento de Heisenberg para os operadores de posição ficam dadas por

Figura 3.10: Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0$ meVnm. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000$ nm e $L_y = 1000$ nm; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20$ nm, $d_y = 20$ nm. A figura (a) é a condição inicial, que é dada pelo autovetor “+” de $\hat{S}_x$, ou seja $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (b) $t = 0.2$ ps, (c) $t = 0.6$ ps, (d) $t = 0.8$ ps.

Figura 3.11: Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0$ meVnm. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000$ nm e $L_y = 1000$ nm; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20$ nm, $d_y = 20$ nm. A figura (a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $(1, 0)$, o autovetor “+” de $\hat{S}_z$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (b) $t = 0.2$ ps, (c) $t = 0.6$ ps, (d) $t = 0.8$ ps.

Figura 3.12: Evolução temporal do pacote Gaussiano bidimensional, submetido a um Hamiltoniano Rashba, com $\alpha = 300.0$ meVnm. Os parâmetros da simulação foram: dimensões do sistema $L_x = 1000$ nm e $L_y = 1000$ nm; número de pontos $N_x \times N_y = \frac{L_x}{5} \times \frac{L_y}{5}$; “largura do pacote” $d_x = 20$ nm, $d_y = 20$ nm; o vetor de onda médio é tal que a velocidade do pacote livre seria $\mathbf{v}_x = 500\hat{i}$ nm/ps. A figura (3.12a) é a condição inicial, que é dada pelo espinor $(1, 0)$ que é autovetor “+” de $\hat{S}_z$, multiplicado por uma função gaussiana em duas dimensões. Os gráficos restantes são referentes aos instantes: (3.12b) $t = 0.2$ ps, (3.12c) $t = 0.6$ ps, (3.12d) $t = 0.8$ ps.

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x(t)}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}^y(t) \quad \text{e} \quad (3.92)$$

$$\frac{d\hat{y}}{dt} = \frac{\hat{p}_y(t)}{m} - \frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}^x(t). \quad (3.93)$$

onde se adotou a representação de Heisenberg para as dependências temporais dos operadores onde, pela clareza da notação, omitiu-se o subscrito (H). Acontece que, sendo a evolução dos operadores de posição relacionados às componentes de spin e sendo esses últimos submetidos à equação dada em (3.41), uma solução geral para as equações (3.92) não é de fácil obtenção. No entanto, pode-se ter uma ideia dos comportamentos de sistemas em casos específicos.

Como exemplo de um desses casos especiais, pode-se pensar na situação em que $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$ ou em que $\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \hat{p}_x \rangle$, i. e., constante e apontando na direção- x . No caso de um momento médio inicial nulo teremos versões bidimensionais do resultado dado pela simulação representada na Figura 3.9. Assim, a simulação referente aos gráficos da Figura 3.10 mostra uma propagação na direção- y e no sentido negativo porque a equação para $\langle y \rangle_t$ é dada por

$$\frac{d\langle y \rangle_t}{dt} = -\frac{\alpha}{\hbar} \langle \sigma_x \rangle_0, \quad (3.94)$$

essa explicação foi confirmada ao ser observado que a propagação do pacote de onda inverte o sentido quando se inverte o sinal de $\langle \sigma_x \rangle_0$. O mesmo ocorre para simulações em que se adota $\langle \sigma_y \rangle_0 = \pm 1$, com a diferença de que nesses casos a propagação se dá prioritariamente na direção- x , ou seja, o padrão observado na Figura 3.9 é rodado em um ângulo de $\pi/2$.

Dessa forma, também pode-se explicar o padrão simétrico do caso mostrado pelas Figura 3.11. Uma vez que não há direção preferencial da componente de spin *in-plane*, não deve haver propagação preferencial. Por fim, vemos nas imagens da Figura 3.12 uma versão bidimensional dos resultados anteriores em que a existência dos dois ramos da relação de dispersão resulta na formação de dois pacotes de onda com velocidades de grupo distintas.

3.4.7 Zitterbewegung

Até este ponto do trabalho, somente resultados obtidos para sistemas livres de campos externos foram apresentados. No entanto, é interessante verificar que o método numérico também é apropriado para tratar a situação em que se tem um campo elétrico *in-plane*, ou seja, em que o vetor $\mathcal{E}$ é paralelo ao plano- xy . Não é só apropriado como também resulta em fenômenos de grande interesse para física de sistemas com acoplamento spin-órbita.

Existem ao menos duas maneiras de incluir um campo elétrico $\mathcal{E}$ ao Hamiltoniano dado em (3.13), sendo que a mais direta é via inserção de um termo de potencial elétrico $V(\mathbf{r}) = -e\mathcal{E}\mathbf{r}$. Porém, no tratamento que se segue usou-se uma abordagem diferente, a saber, adotou-se o Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t)]^2 + \frac{\alpha}{\hbar}\{[\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t)] \times \boldsymbol{\sigma}\} \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.95)$$

Neste contexto, $\mathbf{A}(t)$ representa um potencial vetor, que, no que se segue, é definido por

$$\mathbf{A}(t) = -\mathcal{E}t\hat{\mathbf{x}}. \quad (3.96)$$

Lembrando-se que, por meio das equações de *Maxwell* para sistemas eletrostáticos, é possível chegar ao resultado

$$\mathcal{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}. \quad (3.97)$$

Com isso tem-se um sistema com um campo elétrico sem que a simetria de translação tenha sido quebrada, e assim ainda pode-se evoluir o sistema físico por meio do método de Fourier inteiramente no espaço de momentos. Conforme evolui-se numericamente tais situações, observa-se um comportamento anômalo dos valores de $\langle\hat{x}(t)\rangle$ e $\langle\hat{y}(t)\rangle$. No gráfico da Figura (3.13) vê-se uma amostra do comportamento de $\langle\hat{y}\rangle$.

A condição inicial adotada na simulação para a obtenção da Figura 3.13 foi a de um pacote de onda gaussiano da forma (3.88), com *largura* dada por $d = 450$ nm. Nos cálculos foram usados os valores $\alpha = 50$ meVnm para a constante de acoplamento Rashba e com um campo elétrico dado por $e\mathcal{E} = 0.01 \hat{\mathbf{x}}$ meVnm⁻¹, inserido via o potencial vetor (3.96) no Hamiltoniano (3.95).

A primeira vista pode-se perceber três comportamentos nos gráficos da Fig. 3.13:

- “salto”do valor de $\langle\hat{y}\rangle$ transversal à direção do campo que acelera o pacote (*side-jump*);
- movimento oscilatório em torno do valor médio do *side-jump* (*zitterbewegung*); e
- amortecimento da oscilação levando à convergência.

O termo *zitterbewegung* é uma palavra de origem alemã que pode ser traduzida como “movimento trêmulo”. Esse termo foi utilizado por Schrödinger em um trabalho de 1930 para descrever o movimento oscilatório que aparece na solução da equação de Dirac para partículas

Figura 3.13: Evolução temporal do valor esperado $\langle y(t) \rangle$ num sistema com acoplamento de Rashba e campo elétrico *in-plane* na direção- x . Usou-se duas condições iniciais diferentes para as simulações: um pacote de ondas gaussiano multiplicado por $|\uparrow_z\rangle$; o mesmo pacote gaussiano multiplicado por $|\downarrow_z\rangle$.

livres [25]. Esse fenômeno é devido a interferência entre as soluções da equação de Dirac com energia positiva e aquelas com energia negativa. No contexto do acoplamento Rashba o que se tem é a interferência entre as componentes do spinor que nesse caso estão relacionadas à orientação do spin eletrônico.

No entanto, esse movimento oscilatório, previsto pela equação de Dirac para elétrons livres, possui uma amplitude próxima ao comprimento de onda Compton $R_{ZB} \approx 10^{-12} m$ e uma frequência angular de $\omega_{ZB} \approx 10^{21} Hz$ o que torna impossível sua confirmação experimental.

Assim, sistemas com um relevante acoplamento spin-órbita de Rashba podem figurar entre as opções existentes para se executar *simulações quânticas* [26, 27]. Com a crescente busca por sistemas físicos *controláveis* que possam servir como uma espécie de “plataforma de simulação” para o estudo de sistemas não tão facilmente controláveis, heteroestruturas de materiais semicondutores com forte acoplamento spin-órbita de Rashba podem auxiliar a pesquisa em fenômenos relativísticos na mecânica quântica.

Um termo oscilatório já havia aparecido na dinâmica de ondas planas, como pode ser visto pela equação (3.47), porém naquele caso tratava-se de um sistema sem a presença de um campo externo. Tomando-se o caso de onda plana em que $\mathbf{p} \parallel \mathcal{E}$ e tomando-se $\mathbf{p} = p_x \hat{\mathbf{x}}$, pode-se

chegar às equações de movimento

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x_H(t) &= \frac{1}{i\hbar}[x_H, \mathcal{H}] \\ &= \frac{1}{m}(p_x - eA_x(t)) + \frac{\alpha}{\hbar}\sigma_H^y(t) \quad \text{e}\end{aligned}\quad (3.98)$$

$$\frac{d}{dt}y_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[y_H, \mathcal{H}] = -\frac{\alpha}{\hbar}\sigma_H^x(t). \quad (3.99)$$

Generalizando os resultados apresentados em (3.35) para a situação em que $p_H^x(t) = p_x + e\mathcal{E}_x t$, tem-se que as componentes de spin, dado pelo vetor σ , evoluem de acordo com

$$\sigma_H^x(t) = \sigma_x \cos \left[\frac{2\alpha}{\hbar^2} \left(p_x t + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t^2 \right) \right] + \sigma_z \sin \left[\frac{2\alpha}{\hbar^2} \left(p_x t + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t^2 \right) \right], \quad (3.100)$$

$$\sigma_H^y(t) = \sigma_y, \quad (3.101)$$

e

$$\sigma_H^z(t) = -\sigma_x \sin \left[\frac{2\alpha}{\hbar^2} \left(p_x t + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t^2 \right) \right] + \sigma_z \cos \left[\frac{2\alpha}{\hbar^2} \left(p_x t + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t^2 \right) \right]. \quad (3.102)$$

Assim, se a condição inicial é dada por uma onda plana spin polarizada na direção- z ,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikx} \left| \pm \hat{S}_z \right\rangle, \quad (3.103)$$

teremos que, inicialmente, $\langle \sigma_x \rangle \equiv 0$ e $\langle \sigma_y \rangle \equiv 0$. De maneira que a evolução temporal do valor esperado de $\hat{x}_H$ fica dada por

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{m} \left(p_x t + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t^2 \right) \quad (3.104)$$

equanto que a evolução do valor esperado do operador $\hat{y}_H$ fica

$$\langle y(t) \rangle = -\langle \sigma_z \rangle \frac{\alpha}{\hbar} \int_0^t dt' \sin \left[\frac{2\alpha}{\hbar^2} \left(p_x t' + \frac{1}{2} e\mathcal{E}_x t'^2 \right) \right], \quad (3.105)$$

onde $\langle \sigma_z \rangle$ é calculado para $t = 0$.

Do resultado obtido em (3.105), vemos que o comportamento apresentado na Fig. 3.13 também é esperado para o caso limite de ondas planas. Vê-se claramente a dependência do valor do *side-jump* com a orientação de spin, sendo negativo para $|\uparrow_z\rangle$ e positivo para $|\downarrow_z\rangle$ e, de acordo com o resultado

Figura 3.14: Comparação dos resultados obtidos para o valor esperado $\langle y(t) \rangle$ de forma numérica, com diferentes condições iniciais, e do resultado analítico obtido para onda plana. As curvas que se referem aos pacotes de onda possuem diferentes larguras (d 's), como mostrado na legenda. Vê-se que quanto maior a largura do pacote gaussiano, mais próximo o resultado numérico será do resultado para onda plana. Todos os resultados se referem a condições iniciais spin-polarizadas em $\uparrow_z$.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \sin(\tau^2) = \sqrt{\frac{\pi}{8}}, \quad (3.106)$$

vê-se que a integral que aparece em (3.105) com $p_x \equiv 0$ converge para tempos longos. Dessa forma

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\hbar} \int_0^t dt' \sin\left(\frac{\alpha}{\hbar^2} e \mathcal{E}_x t'^2\right) = \left(\frac{\alpha}{e \mathcal{E}_x}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi}{8}}, \quad (3.107)$$

de modo que para os parâmetros apresentados na Fig. (3.13) tem-se

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle y(t) \rangle \approx 44.3 \text{ nm}, \quad (3.108)$$

que é uma aproximação razoável para a situação do pacote de onda. Esta aproximação é tão melhor quanto maior for a largura inicial do pacote de onda. Isso pode ser observado nos gráficos da figura 3.14, onde para cada curva se adotou os mesmos parâmetros usados para a obtenção dos gráficos da figura 3.13 variando-se apenas as larguras iniciais dos pacotes.

Nesse capítulo, apresentou-se os resultados de simulações para a dinâmica de sistemas com acoplamento spin-órbita de Rashba. Por meio do estudo do caso de ondas planas, obteve-se a intuição do comportamento das excitações de carga dadas por pacotes Gaussianos. A confirmação de comportamentos previstos na literatura, nos trouxe confiança nos resultados numéricos e na possibilidade de se adotar métodos semelhantes no estudo de isolantes topológicos.

O entendimento da física de sistemas com forte acoplamento spin-órbita é de grande interesse para o estudo de isolantes topológicos. Isso porque os sistemas para os quais se espera um comportamento de isolantes topológicos, tanto no caso 2D quanto no caso 3D são formados por elementos químicos pesados para os quais se espera um acoplamento spin-órbita relevante. Sistemas como poços quânticos de HgTe/CdTe e de InAs/GaSb são exemplos de isolantes topológicos 2D que serão abordados no próximo capítulo.

Capítulo 4

Poços Quânticos de $HgTe$

Nesse capítulo iremos focar no sistema físico que levou à primeira realização experimental de um isolante topológico 2D [11] e que é de interesse central para esse trabalho de mestrado. Os estudos feitos sobre poços quânticos de $CdTe/HgTe/CdTe$ mostraram que estes sistemas possuem comportamento de isolantes topológicos no regime chamado de *invertido*. Tal situação é alcançada quando a espessura do poço quântico d_{QW} , composto por $HgTe$, ultrapassa um determinado o crítico $d_C \approx 6.4nm$. O fenômeno responsável pelo surgimento da fase topologicamente não trivial é a chamada *inversão de bandas*, tal mecanismo vem se tornando a principal via de obtenção de Isolantes Topológicos (IT).

No que se segue, iremos descrever melhor o sistema em que estamos interessados explicando o que queremos dizer com o termo “*invertido*”. Apresentaremos também os cálculos de dinâmica eletrônica realizados em duas situações diferentes, caracterizadas pelas condições de contorno a que estamos submetendo nosso sistema.

Figura 4.1: Tipos de Heteroestruturas conforme a estrutura de bandas dos materiais participantes da estrutura. Note-se que, em todos os esquemas, tem-se representados os topos das bandas de valência e os valores mais baixos assumidos pelas bandas de condução.

Figura 4.2: Ordenamento *usual* da estrutura de bandas de um semiconductor obtida por meio do método $k \cdot p$ incluindo a interação *spin-órbita*. Vê-se, além da banda de condução, as bandas conhecidas como *heavy hole band* (HH), *light hole band* (LH) e *split-off band* (SO).

4.1 Inversão de Bandas

A principal característica de poços quânticos semicondutores do tipo-2 e do tipo-3 Fig. (4.1), e que é uma das principais vias para a obtenção de fases topológicas em materiais sólidos, é a *inversão de bandas*. O termo "inversão" pressupõe um ordenamento padrão ou, no mínimo, um ordenamento usual. O semiconductor Telureto de Cádmio ($CdTe$), por exemplo, possui uma ordenamento de bandas similar ao do arseneto de Gálio ($GaAs$) nas proximidades do ponto Γ . Para semicondutores com estrutura cristalina do tipo *zinc-blende* a banda do tipo-s Γ_6 se encontra acima da banda tipo-p Γ_8 . Diz-se que esse ordenamento é *normal* ou usual enquanto que o Telureto de Mercúrio ($HgTe$) possui uma ordenamento de bandas dita "invertida", com a banda Γ_6 abaixo da banda Γ_8 .

A banda denotada por Γ_8 pode ser pensada como sendo constituída por orbitais-p, sendo o momento angular ($L = 1$) e o spin eletrônico por ($S = \frac{1}{2}$) se relacionam via interação spin-órbita. Assim, conclui-se que o momento angular total de Γ_8 é $J = L + S = \frac{3}{2}$, cuja projeção no eixo- z define $\pm\frac{1}{2}$ e $\pm\frac{3}{2}$ como sendo os números quânticos de $\hat{J}_z$. Enquanto que Γ_6 é uma banda de spin- $\frac{1}{2}$ com momento angular orbital igual a *zero* (orbital tipo-s) de modo que os números quânticos de $\hat{J}_z$ são, nesse caso, $\pm\frac{1}{2}$.

Em ambos os materiais ($CdTe$ e $HgTe$) tem-se que o gap de energia assume seu menor valor próximo ao ponto Γ da zona de Brillouin. Assim, desconsiderando a banda *split-off* nos

Figura 4.3: Ordenamento das bandas de energia próximas ao *gap* de energia para o semicondutor *CdTe* e para o semimetal *HgTe*. Em uma análise das figuras pode-se ver o que se classifica como ordenamento invertido da estrutura de bandas do *HgTe*, uma vez que as bandas tipo-*p* que representavam bandas de valência na maioria dos semicondutores, representam bandas de condução para o semimetal *HgTe*. As estruturas de bandas estão apresentadas de forma qualitativa, de modo a mostrar o caráter invertido das bandas de *HgTe*. Os exatos valores dos "gaps" e as formas exatas das curvas não foram levadas em consideração.

restringiremos a um modelo de seis bandas. A combinação dos seis estados descritos acima por meio de um spinor de seis componentes fica

$$\Psi = \left(\left| \Gamma_6, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle \right). \quad (4.1)$$

Esta forma do spinor seria ideal para materiais tridimensionais (3D). Num poço quântico bidimensional, no entanto, essas seis bandas se combinam para formar os estados ($\pm$) de três sub-bandas nomeadas na literatura por E_1 , H_1 e L_1 [1, 11]. Sendo a sub-banda L_1 mais afastada das outras duas, podemos desprezá-la e ficar com um modelo efetivo de quatro bandas para o poço quântico.

No ponto Γ com momento *in-plane* $k_{\parallel} = 0$, m_J ainda é um bom número quântico. Nessa situação a sub-banda do poço quântico $|E1, m_J\rangle$ é formada pela combinação linear de $|\Gamma_6, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle$ e $|\Gamma_8, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle$ enquanto que a sub-banda $|H1, m_J\rangle$ é formada pelos estados $|\Gamma_8, m_J = \pm \frac{3}{2}\rangle$.

Figura 4.4: Diagramas de bandas de poços quânticos de CdTe/HgTe/CdTe. Em linhas tracejadas vê-se as sub-bandas dos estados $|E1\rangle$, $|H1\rangle$, que trocam de ordem em energia quando a espessura do poço quântico ultrapassa o valor crítico d_C .

Fora do ponto- Γ os estados $E1$ e $H1$ podem se misturar. Por meio de argumentos de simetria é possível deduzir a forma geral do Hamiltoniano para os estados $E1$ e $H1$, expressos em termos da base $|E1, m_J = \frac{1}{2}\rangle$, $|H1, m_J = \frac{3}{2}\rangle$ e $|E1, m_J = -\frac{1}{2}\rangle$, $|H1, m_J = -\frac{3}{2}\rangle$:

$$H_{eff}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad H(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) + \sum_i d_i(\mathbf{k})\sigma_i, \quad (4.2)$$

onde σ_i são as matrizes de Pauli. A forma de $H^*(-\mathbf{k})$ é determinada pela simetria de reversão temporal (TRS). Das considerações feitas sobre a simetria do sistema, deduz-se que $d_3(\mathbf{k})$ é uma função par de k enquanto que $d_1(\mathbf{k})$ e $d_2(\mathbf{k})$ são funções ímpares de k , assim, pode-se expandi-los na seguinte forma:

$$d_1 + id_2 = A(k_x + ik_y) \equiv Ak_+, \quad (4.3)$$

$$d_3 = M - B(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.4)$$

$$\epsilon_k = C - D(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.5)$$

onde as constantes A , M , B , C , e D podem ser obtidas via cálculos perturbativos ou via primeiros princípios.

Após a proposta do sistema definido por um poço quântico do tipo-3, propôs-se que em um sistema composto por um poço quântico do tipo-2 poderia-se observar o fenômeno da inversão de bandas. Especificamente tem-se que a heteroestrutura *InAs/GaSb/AlSb* [28] seria tal sistema. Apesar dessa situação poder ser formulada usando um formalismo idêntico ao BHZ, ou seja,

usando um modelo de quatro bandas, tem-se alguns elementos novos a serem considerados neste caso, tais como: bulk inversion asymmetry (BIA) e structural inversion asymmetry (SIA). Dessa forma, por mais que esse trabalho de mestrado seja focado em poços quânticos de HgTe/CdTe, pode-se cogitar estudos futuros considerando poços de *InAs/GaSb/AlSb* em específico.

4.2 Evolução Numérica em isolantes topológicos 2D (modelo BHZ)

A fim de trabalharmos de forma numérica vamos reescrever o Hamiltoniano dado por (4.2) com a mesma notação usada por Scharf et al. [12], ou seja

$$\hat{H}_{BHZ} = \mathcal{C}\mathbb{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar}\hat{p}_x + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar}\hat{p}_y, \quad (4.6)$$

onde as matrizes Γ 's são definidas como sendo

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad \Gamma_2 = \begin{pmatrix} -\sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix}, \quad \Gamma_5 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Nas expressões (4.7) σ_i são as matrizes de Pauli, de modo que, escrevendo de maneira explícita, temos

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

4.2.1 Sistema infinito com condições de contorno periódicas

Para estudarmos o caso de um sistema *infinito* usaremos o operador Hamiltoniano escrito na base de momentos. Dito de outra forma, estaremos interessados no *espaço-k* ou espaço recíproco. Trabalhando na representação de momentos não precisaremos nos preocupar com derivadas e suas representações em termos de diferenças finitas.

Quando o operador Hamiltoniano tiver termos dependentes da posição e outros dependentes de momentos, usaremos a estratégia detalhada na seção 2.6. Num sistema livre (sem *bias* e sem potencial de *gate*) e infinito (condições de contorno periódicas) basta evoluir o sistema

no espaço recíproco e analisar os resultados no espaço de posições. Onde a transformada de Fourier terá o papel de executar a transição entre as duas formulações.

Para a aplicação do algoritmo usou-se o operador (4.6) escrito em termos de $k's$,

$$\hat{H}_{BHZ} = \mathcal{C}\mathbb{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)(k_x^2 + k_y^2) + \mathcal{A}\Gamma_1 k_x + \mathcal{A}\Gamma_2 k_y, \quad (4.9)$$

Como explicado na seção 4.1, os estados $|E_1(H_1), m_J\rangle$ são compostos de combinações lineares de estados de bulk em que há mistura de estados spin-up e spin-down. Os estados $|H_1, m_J\rangle$, por exemplo, são combinações de $|\Gamma_8, \pm\frac{3}{2}\rangle$. Assim, a notação que se segue, onde se adotou as setas $\uparrow$ e $\downarrow$ para se indicar os valores de $(\pm)$ de m_J , deve ser entendida como uma representação da orientação de spin mas que não corresponde *exatamente* à projeção do spin eletrônico sobre o eixo- z . Durante o restante do capítulo, quando se falar em *spin-up* ($\uparrow$) e *spin-down* ($\downarrow$) estaremos sempre nos referindo à esses valores de m_J .

Levando em consideração a forma das matrizes $\Gamma_{1,2,5}$ e $\mathbb{1}$, que são bloco-diagonais, e que o sistema é descrito pelo **spinor**

$$\Psi_{BHZ}(x, y, t) = \begin{pmatrix} \psi_{E\uparrow}(x, y, t) \\ \psi_{H\uparrow}(x, y, t) \\ \psi_{E\downarrow}(x, y, t) \\ \psi_{H\downarrow}(x, y, t) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

pode-se descrever a evolução do sistema como a evolução de dois spinors bidimensionais independentes definidos como a seguir

$$\Psi_{\uparrow}(x, y, t) = \begin{pmatrix} \psi_{E\uparrow}(x, y, t) \\ \psi_{H\uparrow}(x, y, t) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

$$\Psi_{\downarrow}(x, y, t) = \begin{pmatrix} \psi_{E\downarrow}(x, y, t) \\ \psi_{H\downarrow}(x, y, t) \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Aproveitando-se do fato de que o Hamiltoniano (4.9) é bloco diagonal podemos definir os operadores Hamiltonianos $\hat{H}_{\uparrow}$ e $\hat{H}_{\downarrow}$

$$\hat{H}_{\uparrow} = \begin{bmatrix} \mathcal{C} + \mathcal{M} - (\mathcal{D} + \mathcal{B})(k_x^2 + k_y^2) & \mathcal{A}(k_x + ik_y) \\ \mathcal{A}(k_x - ik_y) & \mathcal{C} - \mathcal{M} - (\mathcal{D} - \mathcal{B})(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

e

$$\hat{H}_{\downarrow} = \begin{bmatrix} \mathcal{C} + \mathcal{M} - (\mathcal{D} + \mathcal{B})(k_x^2 + k_y^2) & -\mathcal{A}(k_x - ik_y) \\ -\mathcal{A}(k_x + ik_y) & \mathcal{C} - \mathcal{M} - (\mathcal{D} - \mathcal{B})(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}. \quad (4.14)$$

Os operadores dados por (4.13) e (4.14) serão os responsáveis pela evolução dos spinors dados em (4.11) e (4.12) respectivamente. Ou seja, a evolução temporal do spinor Ψ_{BHZ} (4.10) pode ser obtida evoluindo numericamente suas duas metades separada e independentemente. A evolução temporal é obtida por meio de

$$\tilde{\Psi}_{\sigma}(k_x, k_y, t) = \hat{U}_{\sigma}(t, t_0) \tilde{\Psi}_{\sigma}(k_x, k_y, t_0), \quad (4.15)$$

onde $\hat{U}_{\sigma}(t, t_0)$ é o operador de evolução temporal para as componentes do spinor referentes a *spin-up* e *spin-down*, $\sigma = \uparrow$ e $\sigma = \downarrow$ respectivamente. Explicitamente temos

$$\hat{U}_{\sigma}(t, t_0) = \exp \left\{ -i \frac{\hat{H}_{\sigma}(t - t_0)}{\hbar} \right\}. \quad (4.16)$$

De posse dos operadores definidos por (4.13) e (??) precisamos definir de forma consistente os spinors $\Psi_{\uparrow}$ e $\Psi_{\downarrow}$. Numericamente queremos indexar cada uma das matrizes Hamiltonianas por meio dos números k_x e k_y . Ou seja, para as componentes referentes à projeção *up* do spinor o operador Hamiltoniano pode ser expresso por

$$\mathcal{H}_{\sigma} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{H}_{k_1^x, k_1^y}^{\sigma} \end{bmatrix}_{2 \times 2} & \begin{bmatrix} \hat{H}_{k_2^x, k_1^y}^{\sigma} \end{bmatrix}_{2 \times 2} & \cdots \\ \begin{bmatrix} \hat{H}_{k_1^x, k_2^y}^{\sigma} \end{bmatrix}_{2 \times 2} & \begin{bmatrix} \hat{H}_{k_2^x, k_2^y}^{\sigma} \end{bmatrix}_{2 \times 2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{Ny \times Nx}. \quad (4.17)$$

Posto dessa forma, o spinor $\tilde{\Psi}_{\uparrow(\downarrow)}$ deverá ser dado por uma array em que cada entrada é um vetor com duas componentes, ou seja

$$\tilde{\Psi}_{\sigma} = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_{E_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \\ \tilde{\psi}_{H_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_{E_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \\ \tilde{\psi}_{H_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_{E_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \\ \tilde{\psi}_{H_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_{E_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \\ \tilde{\psi}_{H_{\sigma}}(k_1^x, k_1^y) \end{pmatrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{Ny \times Nx}. \quad (4.18)$$

Dessa forma, a evolução do spinor é obtida pela aplicação do operador de evolução temporal (4.15) elemento a elemento da matriz (4.18).

Assim como foi feito para sistemas livres convencionais e para sistemas com o termo de Rashba, utilizamos pacotes Gaussianos como condição inicial utilizada nas simulações do sistema *BHZ*. De maneira geral temos que sempre estaremos lidando com spinors dados na forma

$$\Psi(x, y, 0) = A \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{(y - y_0)^2}{2d_y^2} \right\} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

onde “ A ” é a constante de normalização, d_x e d_y parametrizam a largura do pacote e $\vec{k}_0$ é o vetor de onda inicial do sistema. Os coeficientes $c_{E\uparrow(\downarrow)}$ e $c_{H\uparrow(\downarrow)}$ são números complexos que indicam a amplitude de probabilidade inicial e a fase relativa dos estados *tipo-elétron* e *tipo-buraco*.

A fim de caracterizar e seguir o movimento do pacote de ondas, calculamos a posição média do pacote em cada instante de tempo. Ou seja,

$$\langle x(t) \rangle = \int \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) x \Psi(\mathbf{r}, t) d^2r \quad (4.20)$$

e

$$\langle y(t) \rangle = \int \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) y \Psi(\mathbf{r}, t) d^2r. \quad (4.21)$$

Além de estudar a evolução de sistemas livres, deseja-se também estudar o efeito causado por potenciais de *gate* e/ou de *bias*. Para contemplar esses casos no nosso modelo basta somar $V(x, y)\mathbb{1}_{4 \times 4}$ ao Hamiltoniano dado por (4.6) ou, de maneira equivalente, $V(x, y)\mathbb{1}_{2 \times 2}$ a ambas expressões dadas em (4.13) e (4.14). Na ausência desses potenciais a evolução temporal pode ser realizada inteiramente no espaço- $\mathbf{k}$, i.e., de momentos. Uma vez que queiramos levar em consideração tais potenciais devemos proceder de acordo com a estratégia “*split-operator*” detalhada na seção 2.6.

Seja a evolução temporal executada inteiramente no espaço- $\mathbf{k}$ seja por meio do *split-operator*, o cálculo da transformada numérica de Fourier e posteriormente da sua inversa fazem um papel fundamental em ambos os algoritmos. No entanto, ao se usar os métodos de *Fast Fourier Transform* (FFT) assume-se que estamos adotando condições de contorno periódicas na direção em que se executa a transformada e a sua inversa. Dessa forma, tais métodos serão úteis somente em sistemas *infinitos*, para sistemas em que se deseja estudar efeitos de borda deve-se adaptar o procedimento que faz uso de diferenças finitas. Essa adaptação está descrita em detalhes na seção a seguir.

4.2.2 Sistema definido por um canal retangular (ou *strip*)

Para o estudo da formação dos chamados *edge states* (estados de borda) é preciso utilizar condições de contorno abertas ao invés de periódicas. Dito de outra forma, é preciso inserir a informação de que nosso sistema possui *bordas* mediante alguma alteração na formulação do método numérico. Podemos simular bordas em nosso sistema de duas maneiras diferentes:

1. Potencial finito; ou
2. Potencial do tipo Hardwall.

A ideia da primeira alternativa é inserir um potencial dependente da posição que possua o formato de um poço retangular. Dessa forma, para além das “paredes do poço” estaríamos fora do plano do isolante topológico sob estudo. Além disso, para simular uma interface com isolantes triviais, o *termo de massa* do Hamiltoniano *BHZ* deve mudar de sinal. Para aplicar a segunda estratégia, por outro lado, temos que reformular os termos dependentes de $\hat{\mathbf{p}}$ do Hamiltoniano em termos de diferenças finitas. Nesta reformulação, é necessário explicitar os limites em que os pacotes de onda possuem valores finitos. Ou seja, no método *hardwall*, temos que dizer explicitamente a partir de onde a função de onda assume o valor *zero*.

Nesse trabalho optou-se pela abordagem *hardwall*. No entanto, implementou-se o método que utiliza o operador de evolução temporal ao invés de utilizar diferenças finitas em ambas as dimensões ou de se adotar o método iterativo de resolução da equação de Schrödinger. Para construir o novo operador de evolução, temos que reescrever o Hamiltoniano dada pela expressão (4.6) em termos de $\hbar k_x$ e $-i\hbar\partial_y$, ou seja

$$\hat{H}_{BHZ} = \mathcal{C}\mathbb{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5) \left[k_x^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + \mathcal{A}\Gamma_1 k_x - i\mathcal{A}\Gamma_2 \left(\frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (4.22)$$

Explorando novamente o formato bloco-diagonal do operador (4.22), podemos separar o operador Hamiltoniano em dois operadores independentes que atuam cada um em uma metade do spinor total. Aqui, assim como na seção anterior, chamaremos as duas metades do spinor total de termos de spin *up* e de spin *down* os quais têm a dinâmica regida pelos Hamiltonianos definidos por

$$\hat{H}_{\uparrow} = \begin{bmatrix} \mathcal{C} + \mathcal{M} - (\mathcal{D} + \mathcal{B})k_x^2 & \mathcal{A}k_x \\ \mathcal{A}k_x & \mathcal{C} - \mathcal{M} - (\mathcal{D} - \mathcal{B})k_x^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (\mathcal{D} + \mathcal{B})\partial_y^2 & \mathcal{A}\partial_y \\ -\mathcal{A}\partial_y & (\mathcal{D} - \mathcal{B})\partial_y^2 \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

e

$$\hat{H}_{\downarrow} = \begin{bmatrix} \mathcal{C} + \mathcal{M} - (\mathcal{D} + \mathcal{B})k_x^2 & -\mathcal{A}k_x \\ -\mathcal{A}k_x & \mathcal{C} - \mathcal{M} - (\mathcal{D} - \mathcal{B})k_x^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (\mathcal{D} + \mathcal{B})\partial_y^2 & \mathcal{A}\partial_y \\ -\mathcal{A}\partial_y & (\mathcal{D} - \mathcal{B})\partial_y^2 \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

respectivamente.

Note que escrevemos os termos dependentes de k_x e ∂_y dos operadores $\hat{H}_{\uparrow}$ e $\hat{H}_{\downarrow}$ de maneira separada com o intuito de facilitar a manipulação. A implementação de diferenças finitas, necessária ao esquema hardwall, é realizada através da substituição dos operadores diferenciais por operadores matriciais tridiagonais dadas por

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{2\Delta y} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

e

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{(\Delta y)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}. \quad (4.26)$$

Os termos restantes dos operadores $\hat{H}_{\uparrow(\downarrow)}$ serão todos multiplicados por matrizes $\mathbb{1}_{N_y \times N_y}$ onde N_y aqui representará o número de pontos existentes ao longo da direção “y” da matriz discreta que representa as componentes do spinor. Como resultado teremos duas matrizes Hamiltonianas, uma para cada componente de spin, com dimensões $2N_y \times 2N_y$ e que serão dependentes de k_x .

Diagonalizando as matrizes $H_{\uparrow}$ e $H_{\downarrow}$ para o intervalo $k_x \in [-0.2, 0.2[$ temos a estrutura de bandas dada na Fig.(4.5). Os resultados apresentados na Fig.(4.5) se referem a um poço quântico com formato de uma tira de largura $w = 200 \text{ nm}$. A discretização utilizada foi de $\Delta y = 1 \text{ nm}$ e os parâmetros do Hamiltoniano de um poço com $d = 7 \text{ nm}$. Dada a discretização do sistema teremos um total de $2N_y$ bandas. Com o intuito de melhorar a visualização a figura

Figura 4.5: Estruturas de bandas de um *quantum well* com "hardwalls" na direção y para as componentes de spin $\uparrow$ e $\downarrow$. Na dimensão y temos uma *strip* de 200 nm enquanto que na dimensão x temos condição de contorno periódica. Os pontos demarcados por N_y e $N_y + 1$ se referem a diferentes bandas de energia e mostram como são numeradas as diferentes bandas obtidas via diagonalização da representação matricial do operador Hamiltoniano.

apresenta apenas as bandas mais próximas à energia zero. Os pontos demarcados por N_y e N_y demarcam diferentes bandas de energia para o valor de $k_x = 0.1 \text{ (nm}^{-1}\text{)}$ e demonstram como as bandas estão ordenadas.

Como podemos ver pelos gráficos das figuras (4.6a) e (4.6b), os autoestados das bandas de índices N_y e $N_y + 1$ resultam em densidades de probabilidade mais localizadas nos limites do sistema, sendo que as funções referentes a banda N_y com $k_x = 0$ possuem uma maior localização. Em outras palavras, esses são os estados de borda característicos de um isolante topológico 2D.

Quando aumentamos o valor de k_x , ou seja, quando consideramos o caso em que o autovalor de momento é não nulo, podemos verificar algumas propriedades das bandas N_y e $N_y + 1$. O que se nota nos gráficos das figuras (4.7a), (4.7b), (4.8a) e (4.8b) é que enquanto os estados da banda N_y tornam-se cada vez mais localizados nas bordas dos materiais, os estados da banda $N_y + 1$ perdem completamente seu caráter de *estados de borda* tornando-se *estados de bulk*.

Essa análise dos autoestados do hamiltoniano definido para uma "tira" bidimensional de HgTe, facilita o entendimento da dinâmica dos pacotes de onda que se segue.

Figura 4.6: Densidades de probabilidades de estados de “edge”, calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0$. (a): spinor *up*; (b): spinor *down*.

Figura 4.7: Densidades de probabilidades de estados de “edge”, calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0.01 \text{ nm}^{-1}$. (a): spinor *up*; (b): spinor *down*.

Figura 4.8: Densidades de probabilidades de estados de “edge”, calculadas para as autofunções referentes às bandas de índice $n = N_y$ e $n = N_y + 1$ com $k_x = 0.1 \text{ nm}^{-1}$, ou seja, funções de onda referentes aos autovalores indicados na Fig.(4.5). (4.8a): spinor *up*; (4.8b): spinor *down*.

4.3 Dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D

4.3.1 O conceito de pseudo-spin

Além do spin, que é o momento angular intrínseco de uma partícula, existem outras quantidades físicas que agem como um spin- $\frac{1}{2}$ efetivo. O termo *pseudo-spin*, que se usa para nomear essas quantidades, foi introduzido por Heisenberg no contexto de física nuclear mas hoje já se encontra em diversos outros contextos, incluindo física do estado sólido. De maneira geral, o pseudo-spin descreve a sobreposição coerente de dois estados quânticos e pode ser descrito em termos de matrizes de Pauli para spins- $\frac{1}{2}$, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

O conceito de pseudo-spin aparece, por exemplo, na descrição de quasipartículas em supercondutores (Nambu pseudospin), na descrição das *sublattices* do grafeno (e de outros materiais bidimensionais com estruturas semelhantes ao grafeno), na formulação do acoplamento entre estados da estrutura hiperfina de átomos frios e etc.

No contexto do modelo BHZ, também pode-se identificar a estrutura de pseudo-spin. Como dito na seção 4.2.1, o spinor adotado no modelo BHZ de quatro bandas, eq. (4.10), pode ser dividido em dois spinors com duas componentes cada expressos por (4.11) e (4.12). Assim, tem-se a estrutura de um sistema de spin- $\frac{1}{2}$ entre os estados $E_\uparrow$ e $H_\uparrow$ o mesmo ocorrendo para os estados $E_\downarrow$ e $H_\downarrow$.

Nas discussões que se seguem, além de manter a notação com setas simples (usuais) ($\uparrow$ e $\downarrow$) para indicar o número quântico m_J , faz-se o uso de setas duplas ($\Uparrow$ e $\Downarrow$) para se referir ao pseudo-spin do estado quântico. Dessa forma, quando $\Psi_{\uparrow(\downarrow)}$ for um autovetor da matriz de Pauli σ_x diremos que o estado possui um pseudo-spin na direção-“x” e indicaremos por $\Uparrow_x$ ($\Downarrow_x$) quando o autovalor for igual a $+1(-1)$. De forma inteiramente análoga deve-se interpretar as direções-“y” e “z” para o pseudo-spin, bem como a notação $\Uparrow_j$ ($\Downarrow_j$) com $j = y, z$.

4.3.2 Pseudo-spin na direção-x

Nessa e nas próximas duas seções, apresentam-se os resultados numéricos para a dinâmica de pacotes de onda em poços quânticos de HgTe/CdTe. Iniciando pelos estados cujo o pseudo-spin está inicialmente orientado na direção-“x”, vê-se nos gráficos da Figura 4.9 o comportamento da posição média dos pacotes de ondas em um sistema “infinito” (condições de contorno periódicas). Para a obtenção dos resultados apresentados na Figura 4.9a, usou-se a definição (4.19) com

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 \\ +1 \\ +1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (4.27)$$

enquanto que para os resultados mostrados na Figura 4.9b, adotou-se

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 \\ -1 \\ +1 \\ +1 \end{bmatrix}. \quad (4.28)$$

Além do caso infinito, nos interessa saber como esses estados se comportam na presença de bordas impenetráveis formando “canais” retangulares ou “tiras” de HgTe. Nas figuras (4.10) e (4.11), vemos a evolução temporal das densidades de probabilidades dadas pelos spinors de duas componentes definidos em (4.11) e (4.12), onde nesse caso específico temos

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ +1 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

para os resultados apresentados nos gráficos da figura (4.10) e

Figura 4.9: Posição média de pacotes gaussianos inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momento médio inicial dado por $\vec{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de 1500×1500 nm com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x(y) = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 2$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: 4.9a) $(+1, +1, +1, -1)$; 4.9b) $(+1, -1, +1, +1)$.

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

para os gráficos da figura (4.11), onde, para ambos os casos, $d_x = d_y = 75$ (nm).

Genericamente, se para um tempo t os spinors forem dados por

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t) = \begin{pmatrix} E_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t) \\ H_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t) \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

então, a densidade de probabilidade é dada por

$$|\psi_{\uparrow(\downarrow)}|^2 = (E_{\uparrow(\downarrow)}^*(x, y, t), H_{\uparrow(\downarrow)}^*(x, y, t)) \begin{pmatrix} E_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t) \\ H_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t) \end{pmatrix} = |E_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t)|^2 + |H_{\uparrow(\downarrow)}(x, y, t)|^2 \quad (4.32)$$

As condições iniciais são idênticas e possuem $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 0$. Os tempos de “frames” na mesma horizontal são iguais e são dados por $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.3$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps seguindo a ordem de baixo para cima. Pela notação adotada, a figura (4.10)

Figura 4.10: Evolução temporal de pacotes de onda onde o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0 \text{ ps}$ (condição inicial), $t_2 = 0.3 \text{ ps}$, $t_3 = 1.0 \text{ ps}$ e $t_4 = 2.0 \text{ ps}$. Os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, 1, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, 1)$.

mostra a evolução dos spinors $\psi_\uparrow$ e $\psi_\downarrow$ com um *Pseudo-Spin* dado pelo autovetor da matriz de Pauli σ_x com autovalor $+1$. A figura (4.11), por outro lado, apresenta a evolução dos mesmos $\Psi_\uparrow$ e $\Psi_\downarrow$ mas agora com o pseudo-spin dado pelo autovetor correspondente ao autovalor -1 .

Nota-se que ao evoluirmos a função de onda no tempo, há um comportamento totalmente diferente de um pacote de ondas evoluindo num sistema “infinito”. Na figura (4.10) vemos que o formato de um pacote gaussiano não resiste por muito tempo sendo que no instante $t_2 = 0.3 \text{ ps}$ já temos algo o que pode ser descrito como uma acumulação na borda superior do canal tanto para $|\psi_\uparrow|^2$ quanto para $|\psi_\downarrow|^2$. Com o passar do tempo, vemos que a excitação na borda descrita por $\psi_\uparrow$ propaga-se com uma velocidade contrária àquela descrita por $\psi_\downarrow$. Em ambos os casos vemos que há contribuições do tipo *bulk* que se difundem pelo sistema e perdem amplitude com o tempo. O mesmo comportamento pode ser visto nos gráficos da figura (4.11), com a diferença

Figura 4.11: Evolução de um pacote de onda onde o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.3$ ps, $t_3 = 0.7$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, -1, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, -1)$.

de que, quando mudamos de $(\uparrow_x)$ para $(\downarrow_x)$, os estados de borda surgem na borda inferior e se propagam em sentidos opostos àqueles observados em (4.10).

Tais comportamentos podem ser melhor entendidos se expandirmos nossa condição inicial em termos das autofunções do Hamiltoniano. Ou seja, dado que nossa condição inicial é dada por um vetor de estado $|\psi_T\rangle$, onde estamos considerando o *spinor total* de quatro componentes, podemos usar a completude da base de autoestados do Hamiltoniano $\{\phi_n\}$ e escrever o estado inicial como

$$\begin{aligned}
 |\psi_T\rangle &= \sum_{n=1}^{2Ny} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi_T \rangle \\
 &= \sum_{n=1}^{2Ny} c_n |\phi_n\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

Figura 4.12: Contribuições dos autoestados do Hamiltoniano *BHZ* na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.10) e (4.11) que aqui são dadas por: (4.12a): para a condição inicial $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_x\rangle$; (4.12b): $|\psi_{\downarrow}, \uparrow_x\rangle$; (4.12c): $|\psi_{\uparrow}, \downarrow_x\rangle$; e (4.12d): $|\psi_{\downarrow}, \downarrow_x\rangle$.

onde $c_n = \langle \phi_n | \psi_T \rangle$. Nos gráficos da figura (4.12) vemos representada sobre a estrutura de bandas do poço quântico a distribuição dos coeficientes c_n 's. Temos que os pontos em destaque sobre as bandas marcam os autovalores E_n cujas autofunções correspondentes ϕ_n aparecem na expansão dada em (4.33) com um coeficiente em que $|c_n|^2$ é dado pelo mapa de cores. Dessa maneira, os pontos com cores mais fortes são aqueles com maior peso estatístico. Pode-se dizer que os gráficos da figura (4.12) mostram a ocupação das bandas quando escolhemos $|\psi_{\uparrow(\downarrow)}, \uparrow_x (\downarrow_x)\rangle$ como condição inicial.

Vê-se por todos os gráficos da figura (4.12) que se tem uma contribuição importante tanto de estados de borda quanto de estados de bulk quando se toma $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_x\rangle$ como condição inicial.

Essas contribuições não são alteradas com a evolução temporal, dado que os valores esperados $\langle E \rangle$ e $\langle \mathbf{k}_x \rangle$ não se alteram.

Pelas ocupações das bandas com dispersão aproximadamente linear vemos que há justificativa para se ter propagação dos estados de borda mesmo com $\langle \mathbf{p}_x \rangle = \hbar \langle \mathbf{k}_x \rangle = 0$, tendo em que a velocidade de grupo na direção- x é dada por

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}. \quad (4.34)$$

Figura 4.13: Pacotes gaussianos inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_x(y) = 75.0$ nm e momentum médio inicial dado por $\vec{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de 1500×1500 nm com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x(y) = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 2$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: 4.13a) $(+1, +i, +1, +i)$; 4.13b) $(+1, -i, +1, -i)$.

4.3.3 Pseudo-spin na direção-y

Seguindo o mesmo procedimento da seção anterior, temos na Figura 4.13 a evolução da posição média dos pacotes de onda com pseudo-spin orientados na direção-“y”. Neste caso, também se adotou um sistema infinito e a condição inicial para os gráficos da Figura 4.13a é dada pela expressão (4.19) onde se usou

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 \\ +i \\ +1 \\ +i \end{bmatrix}, \quad (4.35)$$

enquanto que para os resultados apresentados em 4.13b, adotou-se os coeficientes dados por

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 \\ -i \\ +1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.36)$$

Os gráficos das figuras (4.14) e (4.15) mostram os casos em que se utiliza $|\psi_{\uparrow(\downarrow)}, d_y = \uparrow(\downarrow)\rangle$

Figura 4.14: Evolução de um pacote de onda gaussiano numa “strip” em que o tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Os coeficientes do spinor total, definido em (4.19), foram: **esquerda** $(1, i, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, i)$.

como condições iniciais num sistema com barreiras do tipo hardwall. Ou seja, num sistema limitado na direção “y” por barreiras impenetráveis. Escrita de forma explícita, a função de onda para o estado inicial do sistema é dado por

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

para os resultados apresentados na figura (4.14) e

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

para os resultados da figura (4.15). Em ambos os casos usou-se $d_x = d_y = 75$ (nm).

Figura 4.15: Evolução de um pacote de onda gaussiano numa “strip” com tempo evoluindo no sentido de cima para baixo. Os instantes de cada uma das linhas são: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, -i, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, -i)$.

O que se vê nesses casos, agora, é um comportamento misto onde se observa a evolução de estados de borda e estados de *bulk*. Isso pode ser confirmado ao se verificar a ocupação das subbandas. Nos gráficos apresentados na figura 4.16 vê-se que há uma ocupação considerável tanto de estados pertencentes às bandas com dispersão aproximadamente linear (estados de borda) quanto daquelas com formato de arco (estados de *bulk*). Nota-se que, diferentemente do caso em que o pseudo-spin está alinhado ao eixo-x, existe agora que uma propagação de igual intensidade em ambos os sentidos através das bordas da tira, o que também pode ser concluído do preenchimento de bandas com “lineares” de sinais opostos.

Figura 4.16: Contribuições dos autoestados da Hamiltoniana na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.14) e (4.15) que aqui são dadas por: (4.16a): para a condição inicial $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_y\rangle$; (4.16b): $|\psi_{\downarrow}, \uparrow_y\rangle$; (4.16c): $|\psi_{\uparrow}, \downarrow_y\rangle$; e (4.16d): $|\psi_{\downarrow}, \downarrow_y\rangle$.

4.3.4 Pseudo-spin na direção-z

A última situação analisada nesse trabalho foi a evolução do estado com pseudo-spin orientado inicialmente na direção-“z”. No caso do sistema ilimitado, a situação em que se aplica um campo elétrico in-plane mostrou-se mais interessante que a aquela em que o pacote evolui livremente. Na ausência do campo elétrico, o sistema não performa as trajetórias espiraladas observadas nos casos precedentes, resultando, ao invés disso, numa situação quase que estática da média da posição do pacote de ondas.

A evolução do pacote gaussiano submetido a um campo elétrico na direção-“x”, no entanto, resultou na formação de um padrão semelhante ao zitterbewegung observado nos sistemas com interação Rashba. Os resultados apresentados nos gráficos da Fig. (4.17) mostram a formação de trajetórias diferentes dos casos anteriores apresentados nas seções 4.3.2 e 4.3.3. As condições iniciais adotadas para a obtenção dos gráficos apresentados nas Fig. (4.17) foram

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 \\ 0 \\ +1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

e

$$\begin{bmatrix} c_{E\uparrow} \\ c_{H\uparrow} \\ c_{E\downarrow} \\ c_{H\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ +1 \\ 0 \\ +1 \end{bmatrix}, \quad (4.40)$$

onde, como realizado nos casos anteriores, a evolução temporal foi calculada levando em consideração a divisão do spinor total, com 4 componentes em dois spinors, com 2 componentes cada.

Por fim, os gráficos das figuras (4.18) e (4.19) apresentam os resultados para os sistemas com pseudo-spin orientado na direção-“z” no caso confinado. Nestes casos utilizou-se $|\psi_{\uparrow(\downarrow)}, \uparrow_z (\downarrow_z)\rangle$ como condições iniciais, ou seja

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

para os resultados apresentados na figura (4.18)

Figura 4.17: Condição inicial definida por pacotes gaussianos centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com larguras definidas por $d_{x(y)} = 150.0$ nm e momento médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. O sistema possui dimensões de $4 \times 4 \mu\text{m}$ com condições de contorno periódicas, discretização do espaço dada por $\Delta x = \Delta y = 2.0$ nm e tempo final de simulação igual á $t_f = 4.0$ ps. O sistema foi submetido a um potencial de *bias* $V_b = -10^{-3}x$ meV.

$$\psi_{\uparrow(\downarrow)}(x, y) = A \exp \left\{ -\frac{x^2}{2d_x^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2d_y^2} \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

para os gráficos da figura (4.19). Em ambos os casos usou-se $d_x = d_y = 75$ (nm).

O interessante, agora, é notar que o comportamento do pacote de ondas muda dramaticamente quando se inverte o sentido do pseudo-spin. Isto é, quando muda-se de $|\uparrow(\downarrow), \uparrow\rangle$ para $|\uparrow(\downarrow), \downarrow\rangle$ a população de estados de borda aumenta consideravelmente, passando de “quase inexistente” em $|\uparrow(\downarrow), \uparrow\rangle$ para uma distribuição mais equilibrada em $|\uparrow(\downarrow), \downarrow\rangle$.

4.4 Conclusões preliminares

Por meio do método Fourier-Split, foi possível calcular a evolução temporal do sistema representado pelo spinor quadrimensional para diferentes orientações do que se convencionou chamar de pseudo-spin. Duas geometrias foram estudadas, a saber, um sistema infinito e um sistema com formato de “tira” ou canal 2D.

Para cada situação observou-se diferentes propriedades assumidas pelo pacote Gaussiano. Inicialmente viu-se que em um sistema “infinito”, onde se utilizou condições periódicas de

Figura 4.18: Evolução de um pacote de onda gaussiano inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com largura definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momento médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. Nesse caso o sistema possui é dado por um canal onde as dimensões são de 2000×200 nm. Nessa situação usamos condições de contorno periódicas na dimensão x (horizontal) e hardwall na direção y (vertical). A discretização do espaço usada aqui foi $\Delta x = 0.1$ nm e $\Delta y = 2.0$ nm. O tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(1, 0, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 1, 0)$.

Figura 4.19: Evolução de um pacote de onda gaussiano inicialmente centrados em $(x_0, y_0) = (0, 0)$, com largura definidas por $d_{x(y)} = 75.0$ nm e momentum médio inicial dado por $\mathbf{k} = \vec{0}$. Nesse caso o sistema possui é dado por um canal onde as dimensões são de 2000×200 nm. Nessa situação usamos condições de contorno periódicas na dimensão x (horizontal) e hardwall na direção y (vertical). A discretização do espaço usada aqui foi $\Delta x = 0.1$ nm e $\Delta y = 2.0$ nm. O tempo evolui no sentido de cima para baixo e os instantes de cada uma das imagens foram: $t_1 = 0$ (condição inicial), $t_2 = 0.1$ ps, $t_3 = 1.0$ ps e $t_4 = 2.0$ ps. Inicialmente os coeficientes do spinor definido em (4.19) foram: **esquerda** $(0, 1, 0, 0)$; **direita** $(0, 0, 0, 1)$.

Figura 4.20: Contribuições dos autoestados da Hamiltoniana na formação da condição inicial para os casos apresentados em (4.18) e (4.19) que aqui são dadas por: (4.20a): para a condição inicial $|\psi_{\uparrow}, \uparrow_z\rangle$; (4.20b): $|\psi_{\downarrow}, \uparrow_z\rangle$; (4.20c): $|\psi_{\uparrow}, \downarrow_z\rangle$; e (4.20d): $|\psi_{\downarrow}, \downarrow_z\rangle$.

contorno, a posição média do pacote de ondas performa um padrão que se assemelha ao *zitterbewegung* observado para sistemas com acoplamento spin-órbita de Rashba. Enquanto que para o sistema com bordas impenetráveis, *hardwall*, ficou clara a dependência da ocupação dos estados com a orientação do pseudo-spin.

Nos resultados apresentados na seção 4.3.2, observou-se uma propagação média na direção horizontal (direção-x) durante a evolução do sistema com pseudo-spin na direção-x, acompanhada de oscilações em ambas as direções, resultando, assim, num padrão espiralado mostrado nas Figuras 4.9. Tal padrão de espiral se desenvolveu em torno de um valor médio de $\langle y \rangle$ que graficamente observou-se como sendo $\langle y \rangle \approx \pm 18$ nm conforme $t \rightarrow \infty$. O sinal desse *side-jump* depende se da relação entre spin e pseudo-spin, sendo positivo (negativo) para spin- $\uparrow$ ($\downarrow$) quando o pseudo-spin “paralelo” e negativo (positivo) quando o pseudo-spin é “antiparalelo”.

Resultados semelhantes foram observados na evolução temporal do sistema com pseudo-spin na direção-y, vide seção 4.3.3. Neste caso, no entanto, a propagação média seguiu a direção vertical (direção-y) como mostrado nos gráficos da figura 4.13. Nesta situação o valor de $\langle x \rangle$ parece evoluir para um valor estacionário de aproximadamente ± 18 nm conforme $t \rightarrow \infty$, agora a regra do sinal parece ser mais simples sendo positivo (+) quando spin e pseudo-spin são “paralelos” e negativo (−) quando spin e pseudo-spin são “antiparalelos”.

O caso em que se tem um pseudo-spin na direção-z é interessante pelo fato de se depender de um campo elétrico *in-plane* para desenvolver as trajetórias observadas em Fig. 4.17. Nesta situação, o padrão apresentado pela trajetória, é qualitativamente diferente das citadas anteriormente. Aqui temos novamente uma separação dos spins (denotados por $\uparrow$ e $\downarrow$). Nota-se que essa separação é transversal à direção do campo aplicado, e que o sentido de propagação dos pacotes dependem, assim como nos casos sem campos externos, da direção do pseudo-spin.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Métodos numéricos

Na busca para se obter um método numérico eficiente e preciso, encontramos algumas limitações intrínsecas nos métodos de Runge-Kutta. Além da quantidade de memória requerida e, portanto, do tempo necessário para se simular os sistemas de interesse serem proibitivos, os métodos baseados em diferenças finitas possuem uma limitação quanto a precisão que impôs dificuldades iniciais ao desenvolvimento da pesquisa. A desconfiança acerca da presença de estados espúrios em nossos cálculos, provenientes do problema de *fermion-doubling*, não foram conclusivos mas os problemas com os métodos com diferenças finitas foram superados ao se adotar o método *Fourier-Split* (FS).

Como um meio de aplicar o método *FS* em algum sistema conhecido, evoluiu-se numericamente os sistemas representados por pacotes de ondas Gaussianos unidimensionais livre com e sem a interação spin-órbita de Rashba. Como apresentado no decorrer do capítulo 2, a concordância dos resultados obtidos para o sistema livre serviu como teste de confiabilidade do método. No capítulo seguinte (3) viu-se que a evolução numérica resulta em um comportamento que, no limite de ondas planas, pode previsto analiticamente.

5.2 Dinâmica com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba

Os resultados obtidos para o sistema com interação Rashba são de extremo interesse, em especial pela observação de um pronunciado *side-jump* executado pela posição média do pacote de ondas e sua dependência com os parâmetros controláveis do sistema dada por

$$\langle y \rangle_{t \rightarrow \infty} \propto \sqrt{\frac{\alpha}{e\mathcal{E}}}. \quad (5.1)$$

Assim, pode-se conjecturar que o efeito Hall intrínseco de spin, em sistemas com assimetria de inversão estrutural, pode ser fruto de uma sequência de *side-jumps* devido a propagações balísticas entre os eventos de espalhamento [29].

5.3 Dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos 2D

No capítulo 4, a partir do método *FS*, foi possível a implementação de simulações de sistemas em que pacotes de ondas Gaussianos evoluem livremente ou sob a ação de um campo elétrico *in-plane*. Foi possível também simular sistemas infinitos com a utilização de condições periódicas de contorno, e sistemas com a forma de canal com barreiras laterais impenetráveis (*hardwall*).

Também no caso do isolante topológico, definido pelo poço quântico de *CdTe/HgTe/CdTe*, observou-se o movimento de *zitterbewegung* e um *side-jump*, sendo ambos os efeitos verificados no caso “infinito”.

Para os efeitos observados em sistemas infinitos, verificou-se uma relação interessante entre sentido da propagação da média do pacote e a orientação do *pseudo-spin*. Assim como em casos especiais do sistema Rashba, é interessante notar que houve propagação mesmo na ausência de um campo elétrico *in-plane*. Já na presença do campo elétrico, foi observado um padrão do tipo *zitterbewegung* diferente do caso livre: enquanto esse último apresentava órbitas “espiraladas”, o primeiro apresentou-se na forma de trajetórias oscilatórias em torno de uma posição média de aparência parabólica.

No caso do canal, verificou-se uma dependência com o spin e com o pseudo-spin para a formação de estados de bordas. Tal dependência pôde ser vista ao se analisar as contribuições de estados de *bulk* e de estados de *borda* já nas condições iniciais. Ou seja, não foi observada uma transferência de população de estados no sentido *bulk* $\rightarrow$ *egde*. O que se viu nas simulações foram as evoluções dos diferentes estados que, conforme o tempo passava, se tornavam mais ou menos evidentes, *bulk* e *edge* respectivamente. Isso ocorre devido a “difusão” dos estados de bulk em oposição à manutenção de amplitude dos *edge-states*.

5.4 Possíveis desdobramentos do trabalho e perspectivas futuras

Os modelos adotados neste trabalho são, em si, aproximações de baixa energia extraídas de cálculos do tipo $k\cdot p$. Neste sentido, há um grande espaço para aprimoramentos dos modelos utilizados para torná-los mais realistas na descrição de materiais. Além disso, nos sistemas com acoplamento *spin-órbita* tratados no capítulo sobre a interação Rashba possuem assimetria de inversão no bulk (BIA, na sigla em inglês), essa assimetria pode ser considerada ao se incluir as chamadas contribuições de linear e cúbica de Dresselhaus no Hamiltoniano regente da dinâmica.

Não se pode esquecer que a dinâmica estudada, em ambos os sistemas, considerou sempre o caso balístico, ou seja, sem espalhamento. Assim, estudos em meios difusivos podem ser de grande interesse, dado o alerta de que podem ser custosos computacionalmente.

Em ambos os casos, Rashba e BHZ, pode-se alterar a forma dos campos elétricos. Uma possibilidade de estudo é, através da inserção de um potencial vetor dependente do tempo como feito no sistema Rashba, estudar o efeito de campos elétricos oscilantes tanto na dinâmica de pacotes de onda em isolantes topológicos (livres e confinados) quanto em sistemas com acoplamento *spin-órbita* Rashba (com e sem Dresselhaus).

Pode-se também investigar a dinâmica eletrônica em poços quânticos tipo-II formados pela heteroestrutura InAs/GaSb/AlSb. Proposto como uma alternativa aos poços de HgTe/CdTe o estudo dessa heteroestrutura deve ser realizado considerando-se os efeitos da assimetria de inversão. Lembrando-se que são justamente essas assimetrias que resultam em termos de acoplamento *spin-órbita*, vê-se nessa via de estudo a intersecção dos assuntos tratados nesse trabalho de mestrado.

Referências Bibliográficas

- [1] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, “Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells,” *Science*, vol. 314, no. 5806, pp. 1757–1761, 2006.
- [2] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells,” *Science*, vol. 318, no. 5851, pp. 766–770, 2007.
- [3] *Press Release: The 1998 Nobel Prize in Physics*, Oct 1998 (acessado em 25 de Abril de 2017). https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1998/press.html.
- [4] E. H. Hall, “On a new action of the magnet on electric currents,” *American Journal of Mathematics*, vol. 2, no. 3, pp. 287–292, 1879.
- [5] M.-C. Chang and Q. Niu, “Berry phase, hyperorbits, and the hofstadter spectrum,” *Physical review letters*, vol. 75, no. 7, p. 1348, 1995.
- [6] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, “Berry phase effects on electronic properties,” *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 3, p. 1959, 2010.
- [7] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. MacDonald, and N. Ong, “Anomalous hall effect,” *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 2, p. 1539, 2010.
- [8] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance,” *Physical Review Letters*, vol. 45, no. 6, p. 494, 1980.
- [9] F. D. M. Haldane, “Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the ”parity anomaly”,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, pp. 2015–2018, Oct 1988.

- [10] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum spin hall effect in graphene,” *Physical review letters*, vol. 95, no. 22, p. 226801, 2005.
- [11] B. A. Bernevig and T. L. Hughes, *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [12] B. Scharf, A. Matos-Abiague, and J. Fabian, “Magnetic properties of hgte quantum wells,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 7, p. 075418, 2012.
- [13] N. J. Giordano and H. Nakanishi, *Computational physics*. Prentice Hall Upper Saddle River, 1997.
- [14] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *et al.*, *Numerical recipes*, vol. 3. cambridge University Press, cambridge, 1989.
- [15] A. Soriano, E. A. Navarro, J. A. Portí, and V. Such, “Analysis of the finite difference time domain technique to solve the schrödinger equation for quantum devices,” *Journal of applied physics*, vol. 95, no. 12, pp. 8011–8018, 2004.
- [16] R. R. Haar and L. J. Curtis, “The thomas precession gives $g_e - 1$, not $g_e/2$,” *American Journal of Physics*, vol. 55, no. 11, pp. 1044–1045, 1987.
- [17] L. Susskind, “Lattice fermions,” *Physical Review D*, vol. 16, no. 10, p. 3031, 1977.
- [18] R. Stacey, “Eliminating lattice fermion doubling,” *Physical Review D*, vol. 26, no. 2, p. 468, 1982.
- [19] J. P. Costella, “A new proposal for the fermion doubling problem,” *arXiv preprint hep-lat/0207008*, 2002.
- [20] A. R. Hernández and C. H. Lewenkopf, “Finite-difference method for transport of two-dimensional massless dirac fermions in a ribbon geometry,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 15, p. 155439, 2012.
- [21] S.-Q. Shen, *Topological insulators: Dirac equation in condensed matters*, vol. 174. Springer Science & Business Media, 2013.
- [22] V. Y. Demikhovskii, G. Maksimova, and E. Frolova, “Wave packet dynamics in a two-dimensional electron gas with spin orbit coupling: Splitting and zitterbewegung,” *Physical Review B*, vol. 78, no. 11, p. 115401, 2008.

- [23] J. Schliemann, D. Loss, and R. Westervelt, “Zitterbewegung of electrons and holes in iii–v semiconductor quantum wells,” *Physical Review B*, vol. 73, no. 8, p. 085323, 2006.
- [24] J. Schliemann, D. Loss, and R. Westervelt, “Zitterbewegung of electronic wave packets in iii-v zinc-blende semiconductor quantum wells,” *Physical review letters*, vol. 94, no. 20, p. 206801, 2005.
- [25] E. Schrödinger, “Non powerful motion in the relativistic quantum mechanics,” *Sitzungsb. Preuss. Akad. Wiss. Phys.-Math. Kl*, vol. 24, pp. 418–428, 1930.
- [26] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, “Quantum simulation,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 86, pp. 153–185, Mar 2014.
- [27] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. Roos, “Quantum simulation of the dirac equation,” *Nature*, vol. 463, no. 7277, pp. 68–71, 2010.
- [28] C. Liu, T. L. Hughes, X.-L. Qi, K. Wang, and S.-C. Zhang, “Quantum spin hall effect in inverted type-ii semiconductors,” *Physical review letters*, vol. 100, no. 23, p. 236601, 2008.
- [29] J. Schliemann, “Ballistic side-jump motion of electrons and holes in semiconductor quantum wells,” *Physical Review B*, vol. 75, no. 4, p. 045304, 2007.