Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Transporte eletrônico em isolantes topológicos 2D

Dimy Nanclares Fernandes Sanches

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

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física para a obtenção do título de Mestre em Ciências

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luis Gregório G. V. Dias da Silva (Instituto de Física - USP)

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes (Instituto de Física de São Carlos - USP)

Prof. Dr. Edson Vernek (Instituto de Física - UFU)

São Paulo
2017

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

Sanches, Dimy Nanclares Fernandes

Transporte eletrônico em isolantes topológicos 2D.
São Paulo, 2017.

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

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

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Física da matéria condensada 2. Efeito Hall;
3. Nanoeletrônica; 4. Fenômeno de transporte; 5. Spintrônica.

USP/IF/SBI-020/2017

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Transporte eletrônico em isolantes topológicos 2D

Dimy Nanclares Fernandes Sanches

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

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física para a obtenção do título de Mestre em Ciências

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luis Gregório G. V. Dias da Silva (Instituto de Física - USP)

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes (Instituto de Física de São Carlos - USP)

Prof. Dr. Edson Vernek (Instituto de Física - UFU)

São Paulo
2017

"Always pass on what you have learned."
MESTRE YODA

*“Que nada nos limite, que nada nos defina, que nada nos sujeite.
Que a liberdade seja nossa própria substância.” – SIMONE DE BEAUVOIR*

Dedico este trabalho a todas as cientistas que abriram os caminhos para que eu chegasse até aqui, e também àquelas meninas que, hoje encantadas em descobrir o mundo, ainda virão a nos seguir. Que o descrédito e as tentativas de nos silenciar e apagar da história nunca nos pare.

Agradecimentos

Inúmeras foram as dificuldades que atravessei na minha formação, mas segui porque nunca estive sozinha. Um pouco do que sou hoje é parte de cada um que passou pelo meu caminho, e a eles sou muito grata.

Gostaria de agradecer ao Prof. Luis Gregório, que me acompanhou desde os primeiros anos da graduação, sempre me ensinando e motivando. Obrigada pelas discussões e orientação, que foram enriquecedoras para este trabalho. Não serei capaz de traduzir em palavras a gratidão que sinto pela confiança que depositou em mim e pelo apoio que me deu em momentos difíceis.

Também essenciais para minha formação foram os professores do Instituto de Física da Universidade de São Paulo e meus colegas da graduação e pós-graduação. Em especial, agradeço à Euzi, que foi minha primeira professora nos cursos de Física básica. Sua didática e dedicação me deram a certeza de que eu havia escolhido a carreira certa. Obrigada por ter me introduzido ao Departamento de Física dos Materiais, pelas conversas, histórias e conselhos, por ter me apoiado no momento mais crítico da minha trajetória e por ser uma mulher na academia em quem posso me reconhecer e me inspirar.

Agradeço aos colegas de grupo Marcos Medeiros e David Ruiz Tijerina, pelas valiosas discussões e pela amizade que me dedicaram ao longo desses anos.

De valor inestimável é a contribuição do amigo Franklin Luis neste trabalho e em minha vida. Obrigada pelas intermináveis conversas e insistentes questionamentos. Agradeço à amiga Mariana Cipolla, por estar sempre por perto, sendo essa mulher e física incrível que eu admiro. Ao amigo Thandryus, por me fazer acreditar em um Universo não determinístico, por todo o apoio e carinho dedicados nos momentos difíceis e pelos trabalhos que realizamos em colaboração, meus sinceros agradecimentos.

Ao CEFISMA e a todas as amigas que se fortaleceram na construção de um ambiente acadêmico mais humano, justo e produtivo, Renata Biazzi, Adolfo Forti, Xavier Jr, Zeca Ribeiro, Bruna Nascimento, Maira Rodrigues, Roberto Baldijão e Luisa Buzzo, muito obrigada.

Aos colaboradores Dr. Leandro Lima e Prof. Caio Lewenkopf da Universidade Federal Fluminense, muito obrigada por todo o aprendizado e contribuições que deram para a realização desse trabalho.

Agradeço aos funcionários do Instituto de Física, que tornaram minha permanência na USP

mais prolífera e agradável. Em especial, a Sandra Ribeiro, Rosana Gimenes, Katia Nobre, Hugo Hirata, Éber Lima, Andrea Wirkus e Margarida Soares.

Por fim, agradeço à minha família. Aos meus avós Carmen (in memoriam), Simeão, Cida e Alcides, que apesar de não terem completado, eles próprios, o ensino fundamental, sempre valorizaram meus estudos e apoiaram minhas escolhas. Aos meus pais Rosali e Moacir, meu irmão Gabriel e minha tia Ivone, obrigada pelo carinho e apoio incondicionais.

Resumo

NANCLARES, DIMY. **Transporte eletrônico em isolantes topológicos 2D**. 2016. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo.

Os materiais topológicos compõem uma área de pesquisa de crescente interesse na física da matéria condensada. Para além de sua importância na construção de uma teoria topológica de bandas, seu estudo tem se mostrado rico pela possibilidade de aplicações tecnológicas desses materiais, como a spintrônica e a computação quântica. Neste trabalho, estudamos propriedades de transporte eletrônico em isolantes topológicos bidimensionais (poços quânticos de HgTe/CdTe), materiais que apresentam efeito Hall quântico de spin. Tais sistemas são isolantes no bulk mas possuem estados de borda metálicos, por onde é possível transmitir portadores de carga spin-polarizados. Nosso objetivo é determinar como se dá o transporte dos portadores de carga no interior do material, a nível nanoscópico. Em especial, simulamos tiras de HgTe/CdTe apresentando junções “ $n - X - n$ ”, onde a região central pode ser do tipo n , p ou isolante topológico. Utilizamos ao longo do trabalho os métodos de diferenças finitas e funções de Green recursivas, adaptados ao material estudado. Para diversas configurações do sistema, a estrutura de bandas nas vizinhanças do ponto Γ foi obtida numericamente pela diagonalização do hamiltoniano BHZ, discretizado no espaço das coordenadas pelo método das diferenças finitas. É possível simular os regimes de isolante trivial e isolante topológico por este método, variando os parâmetros do hamiltoniano. Para sistemas no regime topológico, verificamos a existência de estados de borda helicais na ausência de campo magnético. A transmissão de elétrons foi obtida sítio a sítio para tiras de HgTe/CdTe. De fato, quando a tira é ligada a dois contatos injetando carga no sistema, os portadores atravessam o material pelas bordas, respeitando a polarização de spin imposta pelo regime topológico. Utilizando uma tensão de gate V_G adicionada nos cálculos sítio a sítio, as junções “ $n - X - n$ ” foram simuladas. Sistemas desse tipo, na presença de campo magnético, podem atuar como filtros selecionando elétrons spin-polarizados permitidos para atravessá-lo.

Palavras-chave: isolante topológico, transporte eletrônico, efeito Hall, spin

Abstract

NANCLARES, DIMY. **Electronic transport in 2D topological insulators**. 2016. Dissertation (Masters of Science) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo.

The growing interest in topological materials over the last decade has made it a rapidly-expanding research topic in condensed matter physics. Beyond their importance in the formulation of topological band theory, the study of topological insulators and superconductors opens a vast array of possibilities for technological applications in many areas, including spintronics and quantum computing. In this dissertation, we investigated the electronic transport properties of 2D topological insulators. Such systems are bulk insulators, but display metallic edge states, which allows for a current of spin-polarized charge carriers with quantized conductances. We focused on HgTe/CdTe quantum wells, a 2D system known to manifest such properties (the so-called quantum spin Hall effect). Our main goal is to determine the details of the transport processes for charge carriers both in and away from the edges, at nanoscale resolution. More specifically, we simulated HgTe/CdTe quantum well strips with " $n - X - n$ " junctions, where the "X" central region can have carriers of either n -type or p -type or be tuned in the topological insulator regime. We used finite difference and recursive Green functions methods, adapted for the BHZ model, which describes accurately the low-energy physics of HgTe/CdTe quantum wells. The band structure in the neighborhood of the Γ point were obtained numerically for several configurations of the system. To this end, we diagonalized the BHZ hamiltonian matrix in a discretized mesh in the coordinate space using the finite difference method. The transition from trivial insulator to a topological insulator can be accessed by varying the "mass term" in the Hamiltonian. For systems in the topological regime, it was possible to verify the existence of helical edge states in the absence of magnetic fields. Electrons' transmission was obtained site by site for HgTe/CdTe quantum strips. In fact, when the strip is connected to two contacts that inject charge in the system, the carriers pass through the material by the edges, with the polarization imposed by the topological regime. Using a gate voltage V_G added on site in our calculations, a " $n - X - n$ " junction was simulated. Systems of this type, in the presence of magnetic fields, can be used as spin filters, to select spin-polarized electrons flowing through the device.

Keywords: topological insulator, electronic transport, quantum Hall effect, spin

Sumário

1	Introdução	p. 1
1.1	Motivação	p. 1
1.2	Organização da dissertação	p. 2
1.3	Efeito Hall: clássico, quântico e de spin	p. 3
2	Teoria de bandas e o efeito Hall	p. 5
2.1	Teoria de bandas e transporte de elétrons	p. 5
2.1.1	Efeito Hall e a descoberta do elétron	p. 6
2.1.2	Modelos de Drude e Sommerfeld	p. 7
2.1.3	Teoria de bandas	p. 8
2.2	Teoria topológica de bandas	p. 11
2.2.1	Níveis de Landau e o efeito Hall quântico	p. 12
2.2.2	Simetria de reversão temporal e Teorema de Kramers	p. 14
2.2.3	Isolantes Topológicos	p. 23
3	Poços quânticos de HgTe/CdTe	p. 25
3.1	Hamiltoniano BHZ: argumentos de simetria	p. 27
3.2	Primeira confirmação experimental	p. 31
3.3	Discretização do modelo BHZ	p. 32
3.3.1	Método das diferenças finitas	p. 32
3.3.2	Diferenças finitas e o Hamiltoniano BHZ	p. 33

3.3.3	Tira de HgTe/CdTe: solução numérica	p. 35
4	Transporte eletrônico: Método das Funções de Green	p. 43
4.1	Matrizes de Green: método usual	p. 48
4.2	Matrizes de Green: método recursivo	p. 49
4.3	Correntes locais	p. 53
4.4	Transporte eletrônico em poços de HgTe/CdTe	p. 55
5	Tiras de HgTe/CdTe no regime Hall quântico de spin	p. 57
5.1	Campo magnético nulo: estados de borda helicais	p. 58
5.1.1	HgTe/CdTe como isolante trivial	p. 58
5.1.2	HgTe/CdTe como isolante topológico	p. 59
5.2	Transporte eletrônico no regime Hall quântico de spin	p. 63
6	Tiras de HgTe/CdTe na presença de campo magnético	p. 69
6.1	Transporte eletrônico na presença de campo magnético	p. 73
6.2	Junções n-X-n: regimes de transporte	p. 80
7	Conclusão	p. 83
	Referências Bibliográficas	p. 85
	Apêndice A – Transformações adiabáticas do Hamiltoniano	p. 89
	Apêndice B – Invariantes topológicos	p. 93
	Apêndice C – Da equação de Dirac à estrutura de bandas do HgTe e CdTe	p. 97
	Apêndice D – Fórmulas de Kubo-Green e Landauer-Büttiker	p. 101

1 Introdução

1.1 Motivação

Os chamados **materiais topológicos** compõem uma área de pesquisa em franca ascensão na física da matéria condensada. Tal interesse se deve às potenciais aplicações desses materiais, que vão da spintrônica à computação quântica, mas também às contribuições para a física básica.

A spintrônica, já explorada comercialmente em dispositivos metálicos e isolantes, encontra nos materiais topológicos sua versão semicondutora. A manipulação dos spins é empregada desde a fabricação de memória RAM (*MRAM: magnetoresistive random-access memory*) às cabeças de leitura dos discos rígidos. Potencialmente, a spintrônica quântica pode ser também a base de uma nova geração de transistores, chips e processadores.

Uma das grandes barreiras para a execução da computação quântica é o processo de decoerência sofrido pelas partículas nos dispositivos, o que significa a perda de informação. Por possuir estados de borda “protegidos” e armazenar a informação de forma “não local”, materiais topológicos são menos susceptíveis à decoerência, se tornando de notável interesse neste ramo. A primeira proposta de computação quântica topológica foi feita por Alexei Kitaev em 1997 [1], abrindo caminho para os atuais trabalhos na área.

Além de todo apelo tecnológico em torno desses materiais, seu estudo tem se mostrado extremamente rico sob a ótica da pesquisa básica. Algumas partículas previstas inicialmente no âmbito da Física de Altas Energias estão sendo previstas e observadas como um comportamento emergente nesses novos sistemas. É o caso, por exemplo, dos estados ligados de Majorana, que podem surgir quando induzimos supercondutividade de borda nos isolantes topológicos [2].

Até os anos 80 a Física da Matéria Condensada era estruturada em torno da teoria de bandas de Bloch e do paradigma de Landau: os estados da matéria deveriam ser descritos por

um “parâmetro de ordem local”, e as transições de fase eram devidas a quebras de simetria. Percebeu-se, porém, que novos estados recém descobertos [3] não poderiam ser modelados desta forma. A partir disso, uma nova teoria de bandas, mais completa, vem sendo formulada: trata-se da **teoria topológica de bandas**.

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo estudar o transporte eletrônico em isolantes topológicos, a fim de entender o comportamento das cargas e spins ao longo do material, a nível nanoscópico. A partir disso, é possível explicar as propriedades dos portadores de carga em diferentes configurações geométricas e dispositivos. Em particular, estudamos transistores do tipo n - TI - n [4], com o propósito de entender suas propriedades e analisar as possibilidades de aplicação desses sistemas.

1.2 Organização da dissertação

No **Capítulo 2** são apresentados conceitos teóricos envolvidos no estudo de isolantes topológicos e os principais resultados experimentais obtidos nesta área. Exploramos os efeitos Hall quântico e Hall quântico de spin, evidenciando a diferença entre ambos e suas aplicações. Na seção 2.1, são apresentados o modelo de Bloch, teoria de bandas e teoria de bandas topológica é feita na seção 2.1.3, onde introduzimos a teoria de Berry e os invariantes topológicos.

No Capítulo 3 é apresentado o modelo BHZ, que descreve o material estudado neste trabalho: poços quânticos de $HgTe/CdTe$. O método das diferenças finitas, utilizado para as computações numéricas, está descrito na seção 3.3. As equações específicas para o transporte eletrônico no material $HgTe/CdTe$ e a descrição teórica de “transistores” TI e sua modelagem dentro do formalismo utilizado são apresentadas na seção 4.4.

No **Capítulo 4**, é discutida a importância do estudo de transporte eletrônico nos isolantes topológicos e apresentada a teoria utilizada para o desenvolvimento deste trabalho. Na seção 4, está descrito o formalismo das funções de Green e os métodos de cálculo usual e recursivo, utilizados nas computações numéricas.

Os principais resultados são apresentados no **Capítulo 5**. As primeiras seções, 5.1 e 6, analisam o comportamento dos níveis de energia previstos pelo Hamiltoniano BHZ em função de seus parâmetros e das dimensões do material, na ausência e presença de campo magnético, reespectivamente. Em seguida, na seção 5.2, é estudado o transporte eletrônico através de

poços de HgTe/CdTe no regime spin Hall quântico. Correntes locais em transistores TI também são estudadas nesta seção. Todos os resultados foram discutidos e comparados com a teoria e experimentos relatados na literatura. As conclusões do trabalho estão presentes no **Capítulo 7**.

1.3 Efeito Hall: clássico, quântico e de spin

Historicamente, pode-se dizer que a pesquisa nesta área remonta ao estudo do eletromagnetismo. Maxwell acreditava que a força gerada por um campo magnético sobre um fio condutor era exercida sobre todo o material. Ao contrário do que esperava, em 1879 seu aluno E. H. Hall mostrou que a força magnética era exercida somente sobre os portadores de carga, e não sobre o fio em si. Hall havia previsto que, se o campo magnético agisse somente sobre os portadores, seria observado um acúmulo de carga nas bordas do sistema. Consequentemente, uma tensão poderia ser medida entre suas extremidades, como ilustrado na Figura 2.1.

Figura 1.1: Esquema do efeito previsto por Hall. O campo magnético age sobre os portadores de carga, causando um acúmulo nas bordas do sistema.

De fato, este efeito foi observado e hoje é conhecido como **efeito Hall**. Com sucesso, ele foi utilizado para fornecer estimativas sobre o sinal e a densidade dos portadores de carga de alguns materiais. Atualmente é empregado na área de instrumentação.

Em 1971, Dyakonov e Perel previram o **efeito Hall de spin** [5]: devido ao espalhamento assimétrico de partículas com quiralidades opostas, causado por impurezas no material, o sistema passa a acumular spin em suas bordas ao invés de carga elétrica ¹. Assim como o efeito Hall

¹Tal efeito é hoje conhecido como Hall de spin extrínseco, uma vez que é causado por agentes externos (as impurezas). Um efeito Hall de spin intrínseco, devido ao acoplamento spin-órbita do material, foi predito posteriormente e verificado em filmes finos de GaAs e InGaAs, no ano de 2004.

usual, esta previsão se trata também de um fenômeno clássico.

Em 1980, Klitzing observou experimentalmente o **efeito Hall quântico** [3]. Como o nome sugere, esta é a versão quântica do efeito já conhecido. Sob baixas temperaturas ($< 2K$) e altos campos magnéticos, há o acúmulo de carga nas bordas do sistema. Em contraste ao caso clássico, a condutância σ do material se dá em patamares bem definidos, caracterizados por um número quântico ν , onde e é a carga elementar e h é a constante de Planck:

$$\sigma = \nu \frac{e^2}{h}, \quad (1.1)$$

O efeito Hall quântico (QHE) pôde ser explicado em trabalhos realizados por Laughlin e Halperin [6, 7] segundo a teoria dos níveis de Landau, que descreve sistemas de partículas livres na presença de campo magnético. Entretanto, não é possível definir um parâmetro de ordem local para este novo estado da matéria, fazendo com que a transição de fase para o QHE não seja contemplado pelo paradigma de Landau. Em 1982, a constante ν foi definida como um parâmetro de ordem não-local ou topológico, o chamado **invariante TKNN** [8]. Demonstrou-se que ν depende apenas de propriedades topológicas da estrutura de bandas, e que os estados de borda do material eram manifestações de estados topológicos do *bulk*, fato conhecido como **correspondência bulk-borda**.

Em 1988, Haldane propôs um modelo de efeito Hall quântico sem a aplicação de campo magnético externo, evidenciando quais simetrias seriam necessárias para construir um sistema desse tipo [9]. Entretanto, foi apenas com o advento de novas tecnologias e dos recentes estudos em spintrônica que uma nova onda de interesse na área deu origem ao **efeito Hall quântico de spin** (QSHE). Em 2005, Kane e Mele previram tal efeito no grafeno [10] - o que se mostrou inviável devido ao fraco acoplamento spin-órbita do material, necessário para que resultados mensuráveis fossem obtidos. Bernevig et al [11] conjecturaram que o QSHE seria observado em poços quânticos bidimensionais de HgTe/CdTe, sistema que apresenta forte acoplamento spin-órbita. De fato, esta previsão foi verificada experimentalmente por König em 2007 [12].

Posteriormente, outros sistemas QSH e generalizações para o caso tridimensional foram propostos e verificados experimentalmente. Novos **invariantes topológicos** e teorias estão sendo desenvolvidas para abranger as classes de materiais que emergem das pesquisas mais recentes. Os paradigmas atuais estão em produzir sistemas que apresentem as propriedades do QSHE de forma robusta à temperatura ambiente e como construir dispositivos a partir dessas propriedades.

2 *Teoria de bandas e o efeito Hall*

2.1 Teoria de bandas e transporte de elétrons

O estudo de transporte em materiais surgiu do interesse em entender fenômenos térmicos e eletromagnéticos nos objetos que nos cercam. As primeiras teorias datam da Grécia antiga, quando os filósofos da natureza tentavam explicar a eletrização do âmbar. Até o século XVII, acreditava-se que os fenômenos eletromagnéticos eram devidos à existência de um “fluido” que se deslocava nos materiais e podia ser transferido por atrito entre objetos.

A formulação da teoria moderna de comportamento eletrônico teve início no século XIX, quando Georg Simon Ohm propôs uma fórmula empírica para descrever o fenômeno de condutância elétrica em meios macroscópicos:

$$U = RI. \quad (2.1)$$

Tal equação é a versão mais conhecida da **Lei de Ohm**, que estabelece uma relação linear entre a tensão U e a corrente I do sistema, mediada pela resistência do material. Ela descreve com sucesso o transporte de elétrons em condutores, dentro de um certo intervalo de temperaturas e dimensões da amostra. Em termos da densidade de corrente e do campo elétrico, podemos reescrevê-la em sua formulação microscópica:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (2.2)$$

onde σ é a condutividade do meio.

2.1.1 Efeito Hall e a descoberta do elétron

Apesar de sua importância teórica e vasta aplicação tecnológica, a Lei de Ohm não determina de que forma a carga é transportada. Estudos de Ampère e Faraday demonstravam uma relação entre corrente elétrica e campo magnético. E. H. Hall previu que, se o campo agisse sobre **partículas portadoras de carga**, elas se acumulariam nas paredes do sistema, gerando uma diferença de potencial entre as bordas.

Figura 2.1: Esquema do efeito previsto por Hall em 1879. O campo magnético age sobre os portadores de carga, causando um acúmulo nas bordas do sistema.

Hall demonstrou experimentalmente a existência de tais portadores de carga, utilizando o sistema ilustrado na Figura 2.1. Uma placa metálica é submetida a forte campo magnético, perpendicular a sua superfície, e atravessada longitudinalmente por uma corrente I_0 . Como resultado, uma diferença de potencial U_H aparece entre suas bordas, devida ao acúmulo de cargas transversal na amostra.

Devido à maior densidade de carga nas paredes e ao próprio desvio de trajetória das partículas causado pela força magnética, há um aumento nas colisões entre os portadores [13]. Tal efeito implica no aumento da resistência para as cargas atravessarem o material, o que é denominado magnetorresistência. A **magnetorresistência** é dada pela relação:

$$\rho(H) = \frac{E_x}{j_x}, \quad (2.3)$$

onde E_x e j_x são o campo elétrico e a densidade de corrente na direção longitudinal do sistema. Na Figura 2.1, E_x é definido pela diferença de potencial U_{13} e j_0 é calculada a partir da corrente I medida ao longo do material e de sua geometria.

Na direção transversal, outra grandeza caracteriza o sistema: o **coeficiente Hall**, R_H . O acúmulo de cargas nas paredes do material cria um campo elétrico E_y , suficiente para equilibrar a força magnética, levando o sistema a um estado estacionário. R_H é definido por:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H}. \quad (2.4)$$

A medida de R_H é de importância fundamental, uma vez que determina o sinal dos portadores de carga. Os resultados de Hall indicavam a existência de partículas com carga negativa. Estudos realizados por outros cientistas em alguns metais, no entanto, tinham sinal positivo para R_H .

Em 1898, corroborando os resultados de Hall, o experimento de J. J. Thomson com um tubo de raios catódicos confirmou a existência de portadores de carga negativos, conhecidos como **elétrons**. O efeito de R_H positivo só foi explicado posteriormente, pela teoria quântica dos sólidos.

2.1.2 Modelos de Drude e Sommerfeld

A partir do descobrimento dos elétrons, o primeiro modelo para explicar a condução de carga e de calor nos materiais foi formulado por Paul Drude. Os elétrons são considerados esferas maciças idênticas, que transitam em movimento retilíneo até que haja uma colisão. A parte positiva do sólido (uma vez que são eletricamente neutros), fica imóvel, enquanto as cargas negativas são tratadas como um gás.

No **modelo de Drude**, a teoria cinética dos gases é aplicada aos elétrons, complementada com as seguintes hipóteses: 1) aproximação de elétron independente: não há interação eletromagnética entre dois elétrons distintos; 2) aproximação de elétron livre: não há interação eletromagnética entre os elétrons e a região positiva dos materiais; 3) as colisões dos elétrons são eventos instantâneos, que ocorrem entre tempos livres médios τ e 4) os elétrons entram em equilíbrio térmico com a vizinhança através das colisões.

Considerando um tempo livre médio τ constante e na presença de um campo magnético externo, pela segunda lei de Newton, temos

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e \left(\vec{E} + \frac{\vec{p}}{mc} \times \vec{H} \right) - \frac{\vec{p}}{\tau}, \quad (2.5)$$

onde $\vec{p}$ é o momento do elétron, m sua massa, e sua carga, $\vec{E}$ o campo elétrico e $\vec{H}$ o campo

magnético externo. Resolvendo a equação, podemos obter as grandezas de transporte eletrônico pretendidas. Lorentz previu, entretanto, que se o tempo de relaxação τ dependesse da energia, a resistência e a magnetorresistência do material seriam dependentes da temperatura. Tal previsão se mostrou verdadeira em estudos posteriores envolvendo semicondutores.

Com o surgimento da Mecânica Quântica no início do século XX e a subsequente demanda por novas tecnologias, questionou-se se haveria um limite para a validade da Lei de Ohm e do modelo de Drude. A níveis atômicos, conceitos determinísticos ou dependentes da localidade se tornam imprecisos, o que apresenta reflexos no comportamento do material e de suas partículas constituintes. De fato, a Lei de Ohm falha para sistemas com dimensões inferiores aos comprimentos característicos conhecidos como (i) livre caminho médio, (ii) comprimento de onda de de Broglie ou (iii) comprimento de relaxação de fase dos portadores de carga.

A primeira tentativa de conciliar os modelos de transporte conhecidos à mecânica quântica partiu de A. Sommerfeld, em sua teoria semi-clássica. O **modelo de Sommerfeld** utiliza o conceito de gás de elétrons proposto por Drude, mas considera as velocidades eletrônicas regidas pela distribuição de Fermi-Dirac, a “substituta quântica” de Maxwell-Boltzmann.

2.1.3 Teoria de bandas

Os modelos de Drude e Sommerfeld descreveram com sucesso qualitativo o comportamento da condução térmica e elétrica de alguns metais. As aproximações clássicas, entretanto, não são suficientes para explicar todos os efeitos de transporte em sólidos, visto que muitos deles têm origem em fenômenos quânticos. Para suprir tais deficiências, surgem o modelo de Bloch e a teoria de bandas dos materiais [13].

Os sólidos são modelados como **cristais**, onde os íons formados pelo núcleo dos átomos e seus elétrons das camadas mais internas se organizam de forma a compor uma rede. Os elétrons das camadas externas se desprendem dos íons e podem circular ao longo do material, como ilustrado na Figura 2.2. Não há uma trajetória bem definida para os elétrons: na mecânica quântica, não é possível medir a posição e momento de uma partícula num mesmo instante de tempo. A disposição fixa dos íons é responsável por gerar um potencial periódico no sistema.

Partindo da Equação de Schrödinger, temos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (2.6)$$

Figura 2.2: (esq.) Modelo de um cristal ligado a dois contatos. Os íons, em branco, são fixos na rede, enquanto os elétrons, em vermelho, podem se movimentar livremente. A rede central e a rede dos contatos não são idênticas. As posições e trajetórias dos elétrons são meramente ilustrativas, na teoria quântica não é possível determinar o momento de uma partícula e sua posição de forma concomitante. (dir.) Representação do potencial de uma rede periódica 1D.

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}), \quad (2.7)$$

onde $\vec{R}$ é a distância entre dois átomos do cristal. Segundo o **Teorema de Bloch**, as funções de onda ψ são ondas planas moduladas por uma função envelope $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ periódica que deve conter a mesma periodicidade do potencial na rede cristalina:

$$\psi(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.8)$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}). \quad (2.9)$$

A periodicidade da rede determina também a **zona de Brillouin (ZB)**, uma região no espaço $\vec{k}$ capaz de descrever completamente o sistema. Os estados de Bloch $|u_{n\vec{k}}\rangle$, a ZB e translações de seus vetores são suficientes para representar todos os estados do cristal.

Substituindo tal resultado em (2.6), vemos que as energias $E_{\vec{k}}$ permitidas aos portadores de carga também são dependentes de seu número de onda $\vec{k}$. A esta dependência, damos o nome de relação de dispersão. Como exemplo, na Figura 2.3 está traçada a relação $E \times k$ do silício, também denominada **estrutura de bandas**.

Os níveis de energia dos elétrons podem ser agrupados em regiões de condução e valência, podendo existir ou não um “gap” entre elas, isto é, uma região de energias proibidas. Caracterizaremos os sólidos entre condutores, semicondutores e isolantes dependendo das energias permitidas nas bandas e da energia de Fermi - a energia máxima dos estados ocupados no sistema -, como

Figura 2.3: Estrutura de bandas do silício. Os níveis de energia são agrupados nas regiões das bandas de valência e condução. Apenas elétrons na banda de condução são móveis no material.

ilustrado na Figura 2.4.

Figura 2.4: (esq.) Diagrama de um condutor: as bandas de condução e valência são sobrepostas e existem elétrons com energia $E < E_F$ preenchendo estados na banda de condução. (cnt.) Diagrama de um semicondutor: existe um pequeno gap entre as bandas de condução e valência. Elétrons preenchem apenas os estados da banda de valência, mas podem migrar para a banda de condução a temperaturas finitas, por oscilações térmicas. (dir.) Diagrama de um isolante: existe um grande gap entre as bandas de valência e condução, impossibilitando qualquer tipo de transmissão de elétrons no material.

A presença de impurezas ou desordem na rede, como elementos diferentes daqueles que compõem o material, átomos faltando ou deslocados de sua posição ideal, são responsáveis pelo surgimento da resistência elétrica nos sólidos. Em um cristal condutor perfeito, não há resistência elétrica devida ao material: um elétron com $\vec{k} \neq 0$ seria transmitido sem espalhamento através do material, hipoteticamente, com corrente $I \rightarrow \infty$.

Ainda assim, medimos correntes elétricas finitas nos cristais perfeitos: a resistência efetiva

tem origem no retroespalhamento de elétrons na interface contato-amostra, causado por diferenças entre suas redes. A temperaturas fora do zero absoluto, o surgimento de fônons também contribui para a diminuição da condutividade. Partindo da Equação de Schrödinger sob ação de perturbações externas e a teoria de bandas, é possível chegar às fórmulas de Kubo-Greenwood e de Landauer D, que podem ser utilizadas para o cálculo da condutividade nos materiais. Neste trabalho, utilizamos o método das funções de Green para calcular a matriz de transmissão eletrônica no interior do material. Tal matriz é necessária para o cálculo das propriedades de transporte pela fórmula de Landauer, como discutido no Capítulo 4.

2.2 Teoria topológica de bandas

A descoberta e classificação dos estados da matéria são de grande importância para a Física da Matéria Condensada. Acreditava-se que qualquer transição entre estados da matéria poderia ser caracterizada pelo **paradigma de Landau**: quebras espontâneas de simetria implicariam em transições de fase. Nesta teoria, as equações de estado podem ser expandidas em uma série de Taylor nas vizinhanças da transição em função das potências de um parâmetro de ordem.

Um exemplo clássico é dado pela transição para-ferromagnética a temperaturas finitas, manifestada pelo Hamiltoniano de Heisenberg $H = -2J \cdot \sum_{l,l'} \vec{s}_l \cdot \vec{s}_{l'}$, que descreve a interação entre spins da rede cristalina de um material. Para temperaturas altas, os spins encontram-se desordenados, anulando a magnetização $\langle \vec{m} \rangle = 0$ (fase paramagnética). À medida que a temperatura diminui, a energia livre do sistema $F = E + TS$ é dominada pela interação, causando um alinhamento espontâneo dos spins. Há, portanto, uma quebra de simetria e o surgimento de uma magnetização não nula, que é o parâmetro de ordem desta nova fase, denominada ferromagnética. A Figura 2.5 ilustra este processo.

O efeito Hall quântico, entretanto, tem origem em um estado que não quebra qualquer tipo de simetria. Ao contrário dos estados da matéria conhecidos até então, o Hall quântico não podia ser descrito em termos de um parâmetro de ordem local. Os trabalhos desenvolvidos para explicar esta anomalia deram origem à teoria de bandas topológica. Conceitos fundamentais para a descrição desses novos materiais, como fase de Berry, potencial de Berry e os invariantes topológicos (número de Chern, TKNN, Z_2), serão explorados nas seções seguintes.

Figura 2.5: Transição de fase de um sistema paramagnético para um ferromagnético. Com a diminuição da temperatura, é observada uma quebra de simetria na temperatura crítica T_C , onde os spins, antes dispostos aleatoriamente, passam a apontar em uma direção bem definida. O parâmetro de ordem da fase ferromagnética é dado pela magnetização.

2.2.1 Níveis de Landau e o efeito Hall quântico

O efeito Hall quântico (QHE, acrônimo de *Quantum Hall Effect*) é a versão quântica do efeito descoberto por Hall. Um material semiconductor bidimensional é exposto a baixas temperaturas e altos campos magnéticos, fazendo com que seus portadores de carga sofram a ação de uma força perpendicular ao movimento, gerada pelo campo. Para materiais com “comprimento magnético” $l_B \ll L$, onde $l_B^2 = \hbar/eB$ e L seu comprimento, os portadores não conseguem atravessar a amostra: ficam confinados em órbitas circulares dentro do sistema, como ilustrado na Figura 2.6.

Figura 2.6: Esquema do efeito Hall quântico. O campo magnético age sobre os portadores de carga, que se acumulam nas bordas do sistema.

Devido a este efeito, surgem **estados quirais** nas bordas do material, região onde a carga elétrica se acumula. Estados quirais são estados de borda contrapropagantes com spin bem definido: em cada ponta do sistema, portadores de carga de spin up/down selecionados pelo sinal positivo/negativo do campo magnético fluem numa determinada direção.

Definida por (2.3), a magnetorresistência medida no sistema oscila em função do campo magnético, efeito conhecido como Shubnikov-deHaas. Conforme observado por Klitzing em seu experimento de 1980 [3], a condutância σ do material se dá em patamares bem definidos, caracterizados por um número quântico ν :

$$\sigma = \nu \frac{e^2}{h}, \quad (2.10)$$

onde e é a carga elementar e h é a constante de Planck. O parâmetro ν pode ser definido como o **invariante TKNN**, assunto explorado na seção B.

A quantização da condutância e demais aspectos do QHE podem ser explicados pela teoria de **níveis de Landau**, que modela elétrons na presença de campo magnético. Considerando portadores de carga não interagentes, o Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2, \quad (2.11)$$

onde pode ser escolhido o calibre $\vec{A} = Bx \hat{e}_y$. Neste caso, k_y é um bom número quântico e podemos utilizar a hipótese de ondas planas na direção y . As autoenergias são dadas pela equação (2.12), de maneira similar ao oscilador harmônico,

$$E_L = \hbar \omega_c \left(n - \frac{1}{2} \right), \quad \omega_c = \frac{qB}{mc}. \quad (2.12)$$

A constante ω_c é conhecida como frequência de ciclotron. Note que os níveis de energia indexados por n são independentes de k_y , revelando uma degenerescência no sistema. Para ondas planas, temos a relação $k_y = 2\pi N_L / L_y$, de forma que cada nível de energia é N_L vezes degenerado. É possível mostrar que $N_L = eB/h$ e a condutância Hall é dada por $\sigma = Ne/B$ [14], recuperando o resultado (2.10).

Na Figura 2.7 está o resultado original de Klitzing e um diagrama esquemático de seu experimento. Utilizando um transistor n-p-n MOSFET como amostra, a temperatura foi resfriada a $T \approx 1.5K$ na presença de campo magnético de $B \approx 18T$. Medidas de tensão e corrente foram realizadas.

No gráfico da Figura 2.7, a abscissa representa a tensão de gate: um potencial aplicado

Figura 2.7: (Esq.) Resultado original obtido por Klitzing [3]. O gráfico ilustra a tensão Hall U_H e a diferença de potencial U_{PP} ao longo da amostra em função da tensão de gate V_g . (Dir.) Diagrama esquemático do circuito utilizado, evidenciando as grandezas medidas no experimento.

perpendicularmente ao plano do material para variar a posição relativa do nível de Fermi. À medida que a energia de Fermi varre os níveis permitidos, a diferença de potencial longitudinal (U_{PP}) do sistema varia com a densidade de estados. Em seus mínimos, a tensão Hall (U_H) se manifesta em forma de degraus. Cada patamar indica quantos níveis de Landau foram superados pela energia de Fermi, e essa contagem é equivalente ao inteiro ν da equação (2.10).

Medidas de tensão e corrente (portanto, resistência ou condutividade) podem ser feitas de maneira estramamente precisas. Dessa forma, o QHE fornece um método bastante acurado para a estimativa da relação $R_K = h/e^2$, necessária para determinar o valor da constante de estrutura fina. Esta foi a primeira aplicação vislumbrada para o efeito. Atualmente, a constante de Klitzing R_K é utilizada para calibração de unidades de resistência.

2.2.2 Simetria de reversão temporal e Teorema de Kramers

À medida que era desenvolvida, a teoria topológica indicava uma mudança de paradigma em relação à teoria de Landau: as simetrias *mantidas* por um sistema físico podiam ser mais importantes que aquelas violadas. Os estados microscópicos passaram a ser classificados por invariantes, cada um descrevendo determinada simetria respeitada pelo sistema. Nesse contexto, questionou-se se era possível existir um estado do tipo Hall quântico que mantivesse simetria de

reversão temporal (TR - acrônimo de *time reversal*). Apesar do nome sugerir algo como “volta no tempo”, a teoria aborda, na realidade, a reversão do movimento na troca $t \rightarrow -t$.

Simetrias temporais não são uma realidade geral na Física. A segunda lei da termodinâmica nos impõe uma direção preferencial: uma vez que a entropia de um sistema não pode diminuir, processos que causem sua variação são irreversíveis. Entretanto, se olharmos para sistemas idealizados onde não há dissipação de energia, veremos que existem algumas grandezas físicas que preservam esta simetria: a posição de uma partícula, sua aceleração, o campo elétrico, a energia, entre outras grandezas pares com relação ao tempo. Da mesma forma, grandezas ímpares nesta variável não são invariantes sob a troca $t \rightarrow -t$, como a velocidade de um corpo, o momento linear, o angular e o vetor indução magnética.

Grande parte dos processos microscópicos governados pela Mecânica Quântica não envolvem dissipação de energia. Sistemas mesoscópicos, como os estudados neste trabalho, se comportam de forma bastante distinta dependendo se apresentam ou não simetria de reversão temporal. A quebra de TR é fundamental para o desenvolvimento da spintrônica: é através dela que podemos selecionar spins transmitidos por um dispositivo. Por sua vez, a preservação dessa simetria também tem interessantes propriedades físicas e aplicações: materiais desse tipo são ideais para o transporte de informação de forma rápida sem decoerência.

Nesta seção, seguimos a discussão feita por J. J. Sakurai em “Mecânica Quântica Moderna” [15]. Olhando para a equação de Schrödinger, vemos que $\psi(\vec{x}, -t)$ não é uma solução da equação, devido à primeira derivada da função de onda no tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi. \quad (2.13)$$

Por outro lado, se utilizarmos nossa intuição do caso em que o potencial V independe do tempo e substituirmos $\psi^*(\vec{x}, -t) = u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}$ na equação, temos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}] &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}, \\ \Rightarrow i\hbar \left[\frac{-iE_n}{\hbar} \right] u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}, \\ \Rightarrow E_n \psi^*(\vec{x}, -t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^*(\vec{x}, -t), \\ E_n \psi^*(\vec{x}, -t) &= H \psi^*(\vec{x}, -t). \end{aligned} \quad (2.14)$$

A simetria de reversão temporal parece ter relação com o conjugado da função de onda. Estudaremos a seguir transformações com esse tipo de operação.

Definindo uma transformação θ como a composição de um operador unitário U com o operador complexo conjugado K , temos para um ket $|a'\rangle$ da base:

$$\theta = UK, \quad (2.15)$$

$$Kc|a'\rangle = c^*K|a'\rangle = c^*|a'\rangle. \quad (2.16)$$

Uma vez que a base é escrita em termos de um vetor com entradas 0 e 1, não há operação a ser realizada de K sobre $|a'\rangle$. Temos, também, para estados $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ quaisquer

$$\begin{aligned} \theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) &= UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) \\ &= c_1^*UK|\alpha\rangle + c_2^*UK|\beta\rangle, \\ \theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) &= c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle, \end{aligned} \quad (2.17)$$

e ainda:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\theta} |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle, \quad (2.18)$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \theta \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} UK|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle^* = |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'} U|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle^*, \quad (2.19)$$

$$\langle \tilde{\beta}| = \left[\sum_{a'} U|a'\rangle \langle a'|\beta\rangle^* \right]^\dagger = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle \langle a'|U^\dagger, \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle a'|\beta\rangle \langle a'|U^\dagger \langle a''|\alpha\rangle^* U|\alpha\rangle, \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle a'|\beta\rangle \langle a''|\alpha\rangle^* \langle a'|U^\dagger U|\alpha\rangle, \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle a'|\beta\rangle \langle a''|\alpha\rangle^* \langle a'|\alpha\rangle, \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle a'|\beta\rangle \langle a''|\alpha\rangle^* \delta_{a'a''}, \\ &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* \langle a'|\beta\rangle, \\ &= \sum_{a'} \langle \alpha|a'\rangle \langle a'|\beta\rangle, \\ &\langle \tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle \alpha|\beta\rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Chamamos θ na forma (2.15) de operador antiunitário se obedece às relações (2.17) e (2.21).

Esperamos do operador de reversão temporal Θ que transforme $|\vec{p}\rangle$ em $|\vec{-p}\rangle$, a menos de uma fase. Considerando uma pequena evolução temporal de δt , temos

$$|\alpha, 0; \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right) |\alpha\rangle, \quad (2.22)$$

$$|\alpha, 0; -\delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right) |\alpha\rangle, \quad (2.23)$$

onde (2.22) descreve a evolução no sentido do tempo positivo e (2.23) descreve a evolução no sentido do tempo negativo.

Se o sistema é simétrico a reversão do movimento, aplicar o operador Θ no estado e evoluí-lo para δt equivale a evoluí-lo na direção contrária, até $-\delta t$, e aplicar o operador Θ em seguida. Matematicamente:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right) \Theta |\gamma\rangle &= \Theta \left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right) |\gamma\rangle, \\ \Theta \left[\gamma - \frac{\delta t}{\hbar} iH \Theta |\gamma\rangle\right] &= \Theta \left[\gamma + \frac{\delta t}{\hbar} \Theta iH |\gamma\rangle\right], \\ \frac{\delta t}{\hbar} (iH \Theta |\gamma\rangle + \Theta iH |\gamma\rangle) &= 0, \\ (iH \Theta + \Theta iH) |\gamma\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Por outro lado, se o Hamiltoniano é invariante sob reversão temporal, temos $[H, \Theta] = 0$. Substituindo esta informação na expressão (2.24):

$$\begin{aligned} iH \Theta + \Theta iH &= i[H, \Theta], \\ iH \Theta + \Theta iH &= iH \Theta - i\Theta H, \\ \Theta i &= -i\Theta \implies \Theta \text{ antilinear.} \end{aligned}$$

Escreveremos, portanto, Θ como um operador antiunitário $\Theta = UK$, onde U é um operador unitário e K é o operador de conjugação complexa apresentados acima. É importante definir como se dá a transformação de operadores sob a aplicação de Θ . Escrevendo os estados $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ e $|\gamma\rangle$ como

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\xrightarrow{\Theta} |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta |\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle \xrightarrow{\Theta} |\tilde{\beta}\rangle = \Theta |\beta\rangle, \\ |\gamma\rangle &= A^\dagger |\beta\rangle \xrightarrow{CD} \langle\gamma| = \langle\beta| A, \end{aligned}$$

temos para o termo $A_{\alpha\beta}$ de um operador genérico, utilizando a relação (2.21),

$$\begin{aligned}
 \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \langle \gamma | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle, \\
 &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta | \gamma \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^\dagger | \beta \rangle, \\
 &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^\dagger \Theta^{-1} \Theta | \beta \rangle, \\
 &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta A^\dagger \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle, \\
 \implies \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta A \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \text{ se } A \text{ hermitiano.}
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

Dizemos que um observável é par ou ímpar sob reversão temporal se $\Theta A \Theta^{-1} = \pm A$:

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\beta} | A | \tilde{\alpha} \rangle^*. \tag{2.26}$$

Utilizando a relação de completeza para a base $|\vec{x}'\rangle$, derivamos a ação do operador reversão temporal sobre as funções de onda:

$$|\alpha\rangle = \int d^3\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}' | \alpha \rangle, \tag{2.27}$$

$$\begin{aligned}
 \Theta |\alpha\rangle &= \int d^3\vec{x}' \cdot \Theta |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}' | \alpha \rangle^*, \\
 &= \int d^3\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}' | \alpha \rangle^*, \\
 \psi(\vec{x}) &\xrightarrow{\Theta} \psi^*(\vec{x}).
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

Recuperamos, portanto, a relação (2.14) obtida intuitivamente pela Equação de Schrödinger.

Reversão temporal para partículas de spin-1/2

Iniciando com kets de spin na direção $\hat{n}$, autovetores do operador $\vec{S} \cdot \hat{n}$ [15]:

$$|\hat{n}; +\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle, \tag{2.29}$$

$$|\hat{n}; -\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{(\pi+\beta)}{\hbar}S_y} |+\rangle, \tag{2.30}$$

onde β e α são os ângulos polar e azimutal, respectivamente, e $|+\rangle$ está na base de S_z . Aplicando Θ num vetor $|\hat{n}; +\rangle$, esperamos obter a inversão do spin, a menos de uma fase:

$$\Theta |\hat{n}; +\rangle = \eta |\hat{n}; -\rangle, \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \Theta \left[e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle \right] = \eta e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{(\pi+\beta)}{\hbar}S_y} |+\rangle, \\
&\Rightarrow \cancel{e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z}} \cancel{e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y}} \Theta |+\rangle = \eta \cancel{e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z}} e^{-i\frac{(\pi+\beta)}{\hbar}S_y} |+\rangle, \\
&\Rightarrow \Theta |+\rangle = \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_z} |+\rangle = \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_z} K |+\rangle, \\
&\Theta = \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} K \text{ (antiunitário)}.
\end{aligned} \tag{2.32}$$

Generalizando para um momento angular J qualquer, temos

$$\Theta = \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} K. \tag{2.33}$$

Vamos aplicar Θ duas vezes em um estado genérico $|\alpha\rangle$ a fim de obter Θ^2 . Utilizando a relação de completeza sobre a base $|jm\rangle$,

$$\begin{aligned}
\Theta(\Theta|\alpha\rangle) &= \Theta(\Theta \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle), \\
&= \Theta(\eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} K \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle), \\
&= \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} K (\eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle^*), \\
&= \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} \eta^* e^{-i\frac{\pi}{\hbar}J_y} \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle, \\
&= |\eta|^2 e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}J_y} \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle, \\
&= \sum e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}J_y} |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle, \\
\Theta(\Theta|\alpha\rangle) &= \sum (-1)^{2j} |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

$$\Theta^2 |\alpha\rangle = (-1)^{2j} |\alpha\rangle, \text{ para } j \text{ fixo.} \tag{2.35}$$

A relação (2.35) tem uma importante implicação: independente de qualquer fase, sistemas de spin inteiro ($j \in \mathbb{Z}$) possuem $\Theta^2 = 1$ e se comportam de forma distinta de sistemas de spin semi-inteiro, quando $j = (2n+1)/2$, $n \in \mathbb{Z}$. Se considerarmos, por exemplo, um conjunto com número par de elétrons, o spin total será inteiro - se enquadrando no primeiro caso. Conjuntos com número ímpar de elétrons terão spin total semi-inteiro, se comportando conforme $\Theta^2 = -1$.

Supondo um Hamiltoniano invariante sob reversão temporal, temos $[\Theta, H] = 0$:

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \Theta H |n\rangle - H \Theta |n\rangle = 0, \\
&\Rightarrow \Theta E_n |n\rangle = H \Theta |n\rangle, \\
&E_n(\Theta |n\rangle) = H(\Theta |n\rangle).
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Logo, ou $\Theta|n\rangle$ e $|n\rangle$ representam o mesmo estado, ou o sistema é degenerado. No primeiro caso,

$$\begin{aligned}\Theta|n\rangle &= e^{i\delta}|n\rangle, \\ \Theta^2|n\rangle &= \Theta e^{i\delta}|n\rangle = e^{-i\delta}\Theta|n\rangle = e^{-i\delta}e^{i\delta}|n\rangle = |n\rangle,\end{aligned}$$

que implica em $\Theta^2 = 1$, mostrando que apenas sistemas de spin inteiro podem ser invariantes pela transformação Θ e não degenerados. Para spins semi-inteiros, $\Theta^2 = -1$ sempre! A simetria sob reversão temporal força a existência de estados diferentes com mesma energia E_n . Este resultado é conhecido como **Teorema de Kramers**: sistemas com número ímpar de elétrons e invariantes sob Θ são sempre degenerados.

Simetria de reversão temporal em cristais

Estamos interessadas em estudar o efeito da reversão temporal sobre Hamiltonianos de sistemas cristalinos [16]. No formalismo de 2ª quantização, podemos escrever

$$H = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(\vec{k}) c_{\vec{k}\beta\sigma'} \quad (2.37)$$

onde α, β são índices orbitais e σ, σ' são índices de spin.

Para tanto, precisamos entender como os operadores de criação $c_{j\alpha\sigma}^\dagger$ e aniquilamento $c_{j\alpha\sigma}$ de cada sítio da rede se comporta sob Θ . Como queremos a inversão de spin, podemos supor $\Theta c_\uparrow \Theta^{-1} = A c_\downarrow$. Analogamente, $\Theta c_\downarrow \Theta^{-1} = B c_\uparrow$, onde A e B são apenas fases. Iniciando pela ação de $\Theta c_\uparrow$ sobre um estado ocupado por partícula única:

$$\begin{aligned}\Theta c_\uparrow c_\uparrow^\dagger |0\rangle &= \Theta |0\rangle = |0\rangle^* \stackrel{!}{=} A c_\downarrow \Theta c_\uparrow^\dagger |0\rangle = A \Theta^{-1} \Theta c_\downarrow \Theta^{-1} \Theta^2 c_\uparrow^\dagger |0\rangle, \\ &= A \Theta^{-1} B c_\uparrow \Theta^2 c_\uparrow^\dagger |0\rangle = A B^* \Theta^{-1} c_\uparrow (-1) c_\uparrow^\dagger |0\rangle, \\ &= -A B^* \Theta^{-1} c_\uparrow c_\uparrow^\dagger |0\rangle = -A B^* \Theta^{-1} |0\rangle, \\ &= -A B^* |0\rangle^*.\end{aligned}$$

Com base neste resultado, uma forma conveniente para A e B é dada por $i\sigma_{\sigma,\bar{\sigma}} = \pm 1$:

$$\Theta c_{j\alpha\sigma} \Theta^{-1} = i\sigma_{\sigma,\bar{\sigma}} c_{j\alpha\bar{\sigma}}. \quad (2.38)$$

Analogamente, supomos $\Theta c_\uparrow^\dagger \Theta^{-1} = c_\downarrow^\dagger$ e $\Theta c_\downarrow^\dagger \Theta^{-1} = -c_\uparrow^\dagger$, resultando

$$\Theta c_{j\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1} = c_{j\alpha\bar{\sigma}}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T. \quad (2.39)$$

Para obtermos a transformação dos estados de Bloch, tiramos a transformada de Fourier dos coeficientes

$$c_{j\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{k}\alpha\sigma}. \quad (2.40)$$

Utilizando (2.40), temos

$$\begin{aligned} \Theta c_{j\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1} &= \Theta \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger \right) \Theta^{-1}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Theta c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Theta c_{-\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1}. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \Theta c_{j\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1} &\stackrel{(2.39)}{=} c_{j\alpha\bar{\sigma}}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T, \\ \implies \Theta c_{-\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1} &= c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Temos também

$$\begin{aligned} \Theta c_{j\alpha\sigma} \Theta^{-1} &= \Theta \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{k}\alpha\sigma} \right) \Theta^{-1}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Theta c_{\vec{k}\alpha\sigma} \Theta^{-1}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Theta c_{-\vec{k}\alpha\sigma} \Theta^{-1}. \end{aligned}$$

E ainda,

$$\begin{aligned} \Theta c_{j\alpha\sigma} \Theta^{-1} &\stackrel{(2.38)}{=} i\sigma_{\sigma,\bar{\sigma}} c_{j\alpha\bar{\sigma}} = i\sigma_{\sigma,\bar{\sigma}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} c_{\vec{k}\alpha\sigma}, \\ \implies \Theta c_{-\vec{k}\alpha\sigma} \Theta^{-1} &= i\sigma_{\sigma,\bar{\sigma}} c_{\vec{k}\alpha\sigma}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Aplicando o operador de reversão temporal sobre o Hamiltoniano, podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \Theta H \Theta^{-1} &= \Theta \left(\sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(\vec{k}) c_{\vec{k}\alpha\sigma'} \right) \Theta^{-1}, \\
 &= \sum_{\vec{k}} \Theta c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger \Theta^{-1} \Theta h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(\vec{k}) \Theta^{-1} \Theta c_{\vec{k}\alpha\sigma'} \Theta^{-1}, \\
 &= \sum_{\vec{k}} c_{-\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T \Theta h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(\vec{k}) \Theta^{-1} i\sigma_{\sigma',\bar{\sigma}'}^y c_{-\vec{k}\alpha\bar{\sigma}'}, \\
 &= \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\alpha\sigma}^\dagger i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T \Theta h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k}) \Theta^{-1} i\sigma_{\sigma',\bar{\sigma}'}^y c_{\vec{k}\alpha\bar{\sigma}'}.
 \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned}
 \Theta H \Theta^{-1} &= \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\alpha\bar{\sigma}}^\dagger h_{\alpha,\beta}^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}'}(\vec{k}) c_{\vec{k}\alpha\bar{\sigma}'}, \\
 \implies h_{\alpha,\beta}^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}'}(\vec{k}) &= i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T \Theta h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k}) \Theta^{-1} i\sigma_{\sigma',\bar{\sigma}'}^y.
 \end{aligned}$$

Sendo $h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k})$ um número, $\Theta h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k}) = \left[h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k}) \right]^*$:

$$\implies h_{\alpha,\beta}^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}'}(\vec{k}) = i(\sigma^y)_{\bar{\sigma},\sigma}^T \left[h_{\alpha,\beta}^{\sigma,\sigma'}(-\vec{k}) \right]^* i\sigma_{\sigma',\bar{\sigma}'}^y. \quad (2.43)$$

Em uma notação mais limpa, lembrando que Θ age somente sobre os índices de spin, temos

$$\Theta h_{\alpha\beta}(\vec{k}) \Theta^{-1} = h_{\alpha\beta}(-\vec{k}). \quad (2.44)$$

A reversão temporal do Hamiltoniano cristalino $h(\vec{k})$ nos leva, simplesmente, a seu par com vetor de onda na direção contrária $h(-\vec{k})$. Analisando do ponto de vista dos níveis de energia,

$$h(\vec{k}) |u(\vec{k})\rangle = E_{\vec{k}} |u(\vec{k})\rangle, \quad (2.45)$$

temos para o estado $\Theta |u(\vec{k})\rangle$ reverso no tempo

$$h(-\vec{k}) \Theta |u(\vec{k})\rangle = \Theta h(\vec{k}) \Theta^{-1} \Theta |u(\vec{k})\rangle = \Theta h(\vec{k}) |u(\vec{k})\rangle = \Theta E_{\vec{k}} |u(\vec{k})\rangle = E_{\vec{k}} \Theta |u(\vec{k})\rangle.$$

A energia $E_{\vec{k}}$ é, portanto, autovalor de $h(-\vec{k})$ com respectivo autovetor $\Theta |u(\vec{k})\rangle$. Os estados $|u(\vec{k})\rangle$ e $\Theta |u(\vec{k})\rangle$ são pares de Kramers degenerados para $\vec{k}$ e $-\vec{k}$. Apenas alguns pontos especiais ($\vec{k} \equiv -\vec{k}$) denominados momentos invariantes sob reversão temporal mantêm a simetria TR sem degenerescência.

Como corolário, um modelo mínimo para descrever isolantes topológicos com simetria de

reversão temporal e spin-1/2 necessita ter ao menos 4 bandas. Um modelo de 2 bandas seria sempre um metal, visto que é necessário manter a degenerescência entre as bandas nos pontos de momentos invariantes sob reversão temporal.

2.2.3 Isolantes Topológicos

Isolante topológico (TI, acrônimo de *Topological Insulator*) é o nome dado a uma classe de materiais que compartilham a mesma propriedade: são isolantes no bulk, apresentando gap na estrutura de bandas como um isolante usual, mas possuem estados de superfície metálicos com polarização de spin. Como veremos a seguir, esses estados de superfície têm origem na própria topologia de bandas do material.

Diferente de um metal comum, os estados de borda metálicos de um TI são **topologicamente protegidos**, no sentido em que estes estados são robustos frente efeitos tais como a presença de impurezas não magnéticas ou transformações adiabáticas no sistema. Esse comportamento é extremamente útil por reduzir efeitos de espalhamento de spin e decoerência, sendo a base para aplicação na computação quântica ou para a construção de dispositivos que funcionem como *highways* para elétrons spin-polarizados. A natural polarização de spin que esses materiais apresentam e a possibilidade de manipular tais estados, fazem dos isolantes topológicos importantes personagens no ramo da spintrônica.

Em duas dimensões, TI's são materiais que apresentam o chamado **efeito Hall quântico de spin**. A primeira previsão confirmada de um sistema desse tipo foram os poços quânticos de HgTe/CdTe [11, 12]. Posteriormente, poços duplos de InAs/GaSb também se mostraram viáveis [17, 18]. O primeiro isolante topológico 3D proposto e observado foi a liga $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. Uma segunda geração desses materiais surgiu com trabalhos envolvendo Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 [19]. Todos esses sistemas podem ser classificados por **invariantes topológicos**.

Nesse trabalho, focaremos nos isolantes topológicos 2D. Mais especificamente, poços quânticos de HgTe/CdTe. Alguns efeitos e conceitos teóricos serão apresentados nas seções a seguir a fim de aprofundarmos o entendimento nesse tipo de sistema.

3 *Poços quânticos de HgTe/CdTe*

O telureto de mercúrio (HgTe) e o telureto de cádmio (CdTe) possuem a mesma estrutura cristalina: a blenda de zinco ou zincblende. Conforme ilustrado na Figura 3.1, trata-se de duas redes de Bravais cúbicas de face centrada interpenetrantes: em amarelo, um dos elementos Hg/Cd é disposto em uma rede fcc, com base deslocada na direção da diagonal por uma distância de $(\sqrt{3}/4)a_0$ até os átomos de telúrio, em cinza. O valor a_0 é chamado parâmetro de rede.

Figura 3.1: Estrutura cristalina do zincblende. Em amarelo, átomos da rede (Hg/Cd) dispostos em estrutura fcc de parâmetro de rede a_0 , com base deslocada de $(\sqrt{3}/4)a_0$ na direção diagonal. Em cinza, átomos de Te. Crédito: Sphalerite unit cell 3D balls, Benjah-bmm27 (Wikimedia).

Apesar de apresentarem estrutura cristalina quase idênticas, variando apenas ligeiramente por seu parâmetro de rede, a estrutura de bandas do CdTe e do HgTe são muito diferentes. O telureto de cádmio pode ser considerado um semiconductor: há um pequeno gap entre suas bandas Γ_8 e Γ_6 , como pode ser visto na região em torno de $\vec{k} = 0$ na Figura 3.2. A banda Γ_8 , de valência, é uma banda do tipo p: seus dois ramos descrevem a dispersão de buracos leves (LH) - de massa efetiva $[m^*]^{-1} = \partial_k^2 E(k)$ menor - e buracos pesados, de maior massa efetiva. A banda Γ_6 , de condução, é uma banda do tipo n: descreve o movimento dos elétrons no material. A ordem das bandas no CdTe é direta, com energias da banda de valência inferiores às energias da banda de condução.

No telureto de mercúrio há o cenário contrário: este material apresenta inversão de bandas, com energias de Γ_8 maiores que Γ_6 . Note que, isolado, o HgTe é um semimetal: apesar de localmente, nas vizinhanças de $\vec{k} = 0$, apresentar um gap local entre suas bandas de condução e valência, a curvatura da dispersão dos buracos leves em Γ_8 garante que não haja gap para k maiores. As diferenças na dispersão se devem aos termos de correção de massa relativística e acoplamento spin-órbita dos materiais, conforme desenvolvido no Apêndice C.

Figura 3.2: Estrutura de bandas do CdTe e do HgTe [20]. (esq.) Bandas do CdTe: o material apresenta um gap de 1.5 eV, sendo classificado como um semiconductor. A ordem das bandas de valência e condução é direta: Γ_8 (tipo p) apresenta energias inferiores a Γ_6 (tipo n). (dir.) Bandas do HgTe: o material não apresenta gap em sua estrutura de bandas. Apenas localmente, nas vizinhanças de $\vec{k} = 0$, há um gap entre Γ_6 e Γ_8 , que não se mantém para k 's maiores, característica de semimetais. A ordem das bandas de valência e condução é invertida: Γ_6 (tipo n) apresenta energias inferiores a Γ_8 (tipo p).

Para obtermos um isolante topológico é necessária a inversão de bandas, como aquela presente no HgTe. Entretanto, por ser um semimetal, o telureto de mercúrio não possui gap entre os estados do bulk, condição necessária para a construção de um TI. Duas técnicas podem ser utilizadas para que o gap entre os ramos de buracos leves (LH) e pesados (HH) da banda Γ_8 seja aberto, chegando assim ao material cujas propriedades desejamos:

- 1) Aplicar tensão (strain) ao HgTe, resultando em um isolante topológico 3D.
- 2) Confinar o HgTe em um poço do tipo III, resultando em um isolante topológico 2D.

Neste trabalho exploramos a segunda alternativa, que foi proposta por Bernevig, Hughes e Zhang em 2006 [11] e verificada experimentalmente em 2007 [12]. Por possuir ordem direta das bandas, mesma estrutura cristalina e parâmetro de rede muito próximo, o telureto de cádmio se torna o candidato natural a material de barreira, minimizando efeitos de espalhamento nas interfaces entre os materiais. Ligas do tipo $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ também podem ser utilizadas como material de barreira.

A Figura 3.4 ilustra dois poços de $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$ para diferentes espessuras d da camada de telureto de mercúrio. Dependendo da espessura d , as subbandas do poço apresentam ou não a inversão dos estados $E1$ (tipo elétron) e $H1$ (tipo buraco), caracterizando um isolante topológico ou um isolante usual. Para determinada espessura crítica d_c , ocorre uma “transição de fase” entre os casos não-topológico e topológico. A Figura 3.3 mostra as dimensões relevantes do dispositivo e a dependência entre o *gap* nos estados do bulk e o valor d para poços do tipo $\text{Hg}_{0.32}\text{Cd}_{0.68}\text{Te}/\text{HgTe}/\text{Hg}_{0.32}\text{Cd}_{0.68}\text{Te}$ [11]. Neste caso, temos $d_c \approx 6.3\text{nm}$.

Figura 3.3: (esq.) Dimensões do poço de tipo III de largura w e comprimento L , onde o material de barreira, em branco, é o telureto de cádmio, e o material confinado, em cinza, é o telureto de mercúrio. A espessura “ d ” caracteriza o material entre isolante trivial ou topológico, ocorrendo uma “transição de fase” em d_c . (dir.) Energia dos estados $E1$ e $H1$ no ponto Γ em função da espessura d para poços de $\text{Hg}_{0.32}\text{Cd}_{0.68}\text{Te}/\text{HgTe}/\text{Hg}_{0.32}\text{Cd}_{0.68}\text{Te}$. Neste caso, $d_c \approx 6.3\text{nm}$. Créditos: Adaptado de [11].

3.1 Hamiltoniano BHZ: argumentos de simetria

O Hamiltoniano BHZ é um modelo efetivo de quatro bandas que descreve poços quânticos de HgTe/CdTe [11]. Utilizando como base as bandas originais dos materiais componentes e levando em conta argumentos de simetria [16], é possível obter a forma matemática deste Hamiltoniano. Um diagrama esquemático do sistema pode ser visualizado na Figura 3.5.

Figura 3.4: Representação das subbandas de poços quânticos de HgTe/CdTe para diferentes valores de espessura do material confinado. (esq.) Para $d < d_c$, temos um isolante trivial, com ordem direta de subbandas: a energia dos buracos é inferior à dos elétrons. (dir.) Para $d > d_c$, temos um isolante topológico: há um gap entre as subbandas do bulk e inversão na ordem, onde as energias eletrônicas são inferiores às energias dos buracos. Créditos: Adaptado de [11].

Figura 3.5: Regiões I, II e III do poço estudado. Em branco, regiões I e III, de CdTe: bandas Γ_8 e Γ_6 apresentam ordem direta. Em cinza, região II, de HgTe: bandas Γ_8 e Γ_6 apresentam ordem inversa. Nesta região de confinamento, as bandas originais dão origem às subbandas do poço.

No poço, as bandas originais dão origem a subbandas. A primeira aproximação para uma descrição efetiva do material será considerarmos apenas as bandas Γ_6 e Γ_8 para nossos cálculos. As bandas Γ_7 originais contribuem com correções inferiores a 5% nos níveis de energia, e as demais bandas com valores ainda menores.

Desta forma, temos a base $\left\{ \left| \Gamma_6, +\frac{1}{2} \right\rangle; \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle; \left| \Gamma_8, +\frac{3}{2} \right\rangle; \left| \Gamma_8, +\frac{1}{2} \right\rangle; \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle; \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle \right\}$. Em torno do ponto Γ , onde $\vec{k} = 0$, o número quântico m_j relativo ao momento angular total do portador de carga é um bom número quântico, e as subbandas podem ser escritas como

as seguintes combinações lineares:

$$\begin{aligned}
 |E1, \uparrow\rangle &= f_1(z) \left| \Gamma_6, +\frac{1}{2} \right\rangle + f_2(z) \left| \Gamma_8, +\frac{1}{2} \right\rangle, \\
 |H1, \uparrow\rangle &= f_3(z) \left| \Gamma_8, +\frac{3}{2} \right\rangle, \\
 |E1, \downarrow\rangle &= f_4(z) \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle + f_5(z) \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle, \\
 |H1, \downarrow\rangle &= f_6(z) \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $E1$ é uma subbanda do tipo elétron, correspondente à subbanda de condução de menor energia, e $H1$ é uma subbanda do tipo buraco, correspondente à subbanda de valência de maior energia. Fora do ponto Γ , os estados $E1$ e $H1$ podem se misturar.

A segunda aproximação considerada é que faremos um modelo efetivo para valores de $\vec{k}$ pequenos, pois temos interesse em descrever o Hamiltoniano em torno do ponto Γ . Neste caso, podemos escrever H_{eff} como uma expansão em potências de $\vec{k}$, desprezando termos de ordem superior a $\mathcal{O}(k^2)$. Na subbase ordenada $\{|E1, \uparrow\rangle; |H1, \uparrow\rangle; |E1, \downarrow\rangle; |H1, \downarrow\rangle\}$, temos

$$H_{eff}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h_+(\mathbf{k}) & T \\ T^\dagger & h_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \tag{3.2}$$

onde h_+ , h_- e T são matrizes 2×2 . A matriz T acopla os estados de spin up aos estados de spin down.

O sistema de interesse deve possuir simetria de reversão temporal. Pelo teorema de Kramers, temos que $h_-(\mathbf{k}) = h_+^*(-\mathbf{k})$. Usando uma terceira aproximação, de que não há quebra de simetria de inversão com relação ao eixo z , temos que as subbandas $|E1, \uparrow\rangle$ e $|E1, \downarrow\rangle$ possuem a mesma simetria espacial, sendo possível o acoplamento entre elas apenas com operadores pares em $\vec{k}$. Entretanto, para levar $|E1, \uparrow\rangle$ em $|E1, \downarrow\rangle$ devemos ter uma transformação que resulte $\Delta L_z = 1$, o que necessita de um operador linear em $\vec{k}$. Problemas análogos ocorrem para o acoplamento de outras subbandas de spins opostos. Desta forma, não é possível relacionar subbandas de spin up e down, e a matriz T se anula. Ficamos com

$$H_{eff}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad h(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) + \sum_i d_i(\mathbf{k}) \sigma_i. \tag{3.3}$$

Como a matriz h precisa ser hermitiana, podemos expandi-la na forma

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) \cdot \mathbb{I} + \sum_i d_i(\mathbf{k}) \sigma_i, \tag{3.4}$$

onde σ_i são as matrizes de Pauli.

Ainda analisando a paridade das subbandas com relação a $\vec{k}$, termos diagonais na matriz h devem ser pares frente a operação $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$. Para acoplar $|E1, \uparrow\rangle$ e $|H1, \uparrow\rangle$, precisamos de uma transformação ímpar com $\Delta L_z = 1$. O operador que se ajusta a tais condições é $k_x + ik_y$. Lembrando de desprezar termos de ordem superior a $\mathcal{O}(k^2)$, chegamos aos resultados

$$\begin{aligned}\epsilon(\vec{k}) &= \mathcal{C} - \mathcal{D}(k_x^2 + k_y^2), \\ d_1 + id_2 &= \mathcal{A}(k_x + ik_y) = \mathcal{A}k_+, \\ d_3 &= \mathcal{M} - \mathcal{B}(k_x^2 + k_y^2).\end{aligned}\tag{3.5}$$

Escrito de outra maneira, temos o Hamiltoniano efetivo

$$\hat{H} = \mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar} \hat{p}_y,\tag{3.6}$$

onde Γ_1 , Γ_2 e Γ_5 são matrizes de Dirac e os parâmetros $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{D}$ e $\mathcal{M}$ são constantes dependentes apenas da espessura de HgTe no poço.

Na presença de campo magnético, somamos o termo Zeeman e realizamos o acoplamento mínimo $\mathbf{p} \rightarrow (\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})$. Neste trabalho, foi considerado o calibre $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -By\hat{e}_x$ ($\mathbf{B} = B_0\hat{e}_z$), resultando em

$$\hat{H} = \mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} \left[\left(\hat{p}_x - \frac{\hbar y}{l_B^2} \right)^2 + \hat{p}_y^2 \right] + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar} \left(\hat{p}_x - \frac{\hbar y}{l_B^2} \right) + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar} \hat{p}_y + \frac{\mu_B B_0 \Gamma_g^z}{2},\tag{3.7}$$

com Γ_1 , Γ_2 , Γ_5 e Γ_g^z matrizes (4×4) escritas na base $\{|E \uparrow\rangle, |H \uparrow\rangle, |E \downarrow\rangle, |H \downarrow\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, & \Gamma_2 &= \begin{pmatrix} -\sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix}, \\ \Gamma_5 &= \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, & \Gamma_g^z &= \begin{pmatrix} \sigma_g & 0 \\ 0 & -\sigma_g \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{3.8}$$

onde $\sigma_{x,y,z}$ são as matrizes de Pauli e $\sigma_g = \text{diag}(g_e, g_h)$ contém os fatores- g efetivos para os elétrons e buracos, respectivamente.

Fisicamente, $\mathcal{M}$ é conhecido como “termo de massa” e determina a largura do gap no bulk do material. Se $\mathcal{M} < 0$, o sistema apresenta inversão de bandas. O parâmetro $\mathcal{C}$ apenas desloca o espectro verticalmente em energia, sendo um grau de liberdade para a escolha do “zero”. $\mathcal{A}$ fornece a magnitude do acoplamento entre diferentes subbandas, enquanto os parâmetros $\mathcal{B}$ e $\mathcal{D}$

são relativos aos termos diagonais do Hamiltoniano.

3.2 Primeira confirmação experimental

Após a proposição teórica de poços quânticos de telureto de mercúrio como candidatos a apresentar efeito spin Hall quântico, grupos experimentais iniciaram a busca por estados de borda e quantização da condutância nesses materiais, mesmo na ausência de campo magnético. A confirmação do HgTe/CdTe como isolante topológico veio em 2007 [12], pelo grupo de Laurens Molenkamp, da Universidade de Würzburg, Alemanha.

Poços de HgTe foram crescidos por epitaxia de feixe molecular (MBE), utilizando telureto de cádmio como barreira. Entre as dificuldades experimentais, foi necessário desenvolver técnicas avançadas para a litografia da amostra, por conta da alta volatilidade do mercúrio. A construção de poços com portadores de carga de alta mobilidade e formas de realizar o ajuste fino da energia de Fermi também foram fundamentais para o sucesso das medidas.

Barras Hall de 4 tamanhos ($L \times w$) distintos foram utilizadas nos experimentos: ($600 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$), ($20.0 \mu\text{m} \times 13.3 \mu\text{m}$), ($1.0 \mu\text{m} \times 1.0 \mu\text{m}$) e ($1.0 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$). As medidas de transporte foram realizadas a temperaturas inferiores a 30mK, em ambiente resfriado por Hélio líquido. A amostra maior foi utilizada como referência: medidas Hall foram realizadas para a caracterização do material. Os principais resultados estão ilustrados na Figura 3.6.

Para dispositivos com estrutura de bandas direta ($d=5.5 \text{ nm}$), a curva de resistência medida na região do gap apresentou valores altíssimos, caracterizando um isolante trivial. A amostra de dimensões ($20.0 \mu\text{m} \times 13.3 \mu\text{m}$) e espessura de HgTe $d=7.3\text{nm}$, teve sua resistência drasticamente reduzida em relação à primeira amostra, indicando a existência de estados condutores no material. Entretanto, a condutância não se deu em valores quantizados como esperado para um isolante topológico.

A confirmação do material em regime Hall quântico de spin veio para as amostras de dimensões ($1.0 \mu\text{m} \times 1.0 \mu\text{m}$) e ($1.0 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$), com espessura $d=7.3\text{nm}$. Foram medidos patamares bem definidos de resistência, correspondentes dois quanta de condutância, prevista teoricamente para esse tipo de sistema.

Figura 3.6: Medidas de resistência para diversos poços quânticos com estrutura de bandas normal (*I*, $d=5.5\text{nm}$) e invertida (*II*, *III* e *IV*, $d=7.3\text{nm}$) na ausência de campo magnético a $T=30\text{mK}$. Os dispositivos *I* e *II* têm dimensões ($20.0\text{ }\mu\text{m} \times 13.3\text{ }\mu\text{m}$), enquanto os dispositivos *III* e *IV* possuem dimensões ($1.0\text{ }\mu\text{m} \times 1.0\text{ }\mu\text{m}$) e ($1.0\text{ }\mu\text{m} \times 0.5\text{ }\mu\text{m}$), respectivamente. A curva *I* caracteriza um isolante trivial, apresentando altíssima resistência na região do gap. A amostra *II* teve sua resistência reduzida em comparação à primeira, embora não tenha sido medida condutância quantizada. Para as amostras *III* e *IV*, foram obtidos platôs na resistência, equivalentes à quantização esperada para materiais no regime Hall quântico de spin. Créditos: König et al [12].

3.3 Discretização do modelo BHZ

A seguir, apresentamos uma maneira de expressar o Hamiltoniano BHZ como uma rede bidimensional, modelo utilizado ao longo deste trabalho, que é útil para obter informações de diferentes dispositivos baseados em poços de HgTe/CdTe por meio de cálculos numéricos. Campos magnéticos, potenciais externos e a geometria do sistema podem ser variados de forma mais livre com esta aproximação.

3.3.1 Método das diferenças finitas

Qualquer função analítica $f(x+h)$ pode ser expandida como uma série de Taylor em torno de $h=0$, da seguinte forma:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2!} + \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \mathcal{O}(h^4). \quad (3.9)$$

Analogamente, para $f(x-h)$, escrevemos

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2!} - \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \mathcal{O}(h^4). \quad (3.10)$$

Subtraindo (3.10) de (3.9), obtemos uma equação para a derivada da função f ,

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.11)$$

denominada fórmula das diferenças centradas. Por outro lado, somando tais equações e dividindo por h^2 , a segunda derivada resulta em

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.12)$$

Ao ignorar os termos de erro $\mathcal{O}(h)$ ou superiores, isto é, escolhendo um valor pequeno o suficiente para h , podemos escrever as derivadas de uma função pela aproximação de diferenças finitas. Utilizaremos as fórmulas (3.11) e (3.12) para resolver equações diferenciais de segunda ordem numericamente.

3.3.2 Diferenças finitas e o Hamiltoniano BHZ

Figura 3.7: Ilustração de um sistema plano com dimensões $w \times L$. O espaço é discretizado em uma rede de parâmetro “a” de forma que $L = a \cdot n$ e $w = a \cdot m$. São consideradas para os cálculos apenas interações entre primeiros vizinhos.

Utilizando o método das diferenças finitas, trabalhamos no espaço das coordenadas, discretizando $x \rightarrow x_n = na$ e $y \rightarrow y_m = ma$ em uma rede, com $n, m \in \mathbb{Z}$. A Figura 3.7 contém uma representação do sistema utilizado, onde o material é plano de dimensões $w \times L$. As interações

entre pares da rede que não forem primeiros vizinhos são desprezadas. Matematicamente, isso significa tomar as derivadas do Hamiltoniano segundo (3.11) e (3.12):

$$\begin{aligned}
 p_x &= -i\hbar \frac{\partial \Psi(x,y)}{\partial x} \rightarrow \frac{-i\hbar}{2a} (\Psi_{n+1,m} - \Psi_{n-1,m}), \\
 p_x^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial^2 x} \rightarrow \frac{-\hbar^2}{a^2} (\Psi_{n+1,m} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n-1,m}), \\
 p_y &= -i\hbar \frac{\partial \Psi(x,y)}{\partial y} \rightarrow \frac{-i\hbar}{2a} (\Psi_{n,m+1} - \Psi_{n,m-1}), \\
 p_y^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial^2 y} \rightarrow \frac{-\hbar^2}{a^2} (\Psi_{n,m+1} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n,m-1}).
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Iniciando com o Hamiltoniano efetivo (3.6) a campo nulo,

$$\hat{H} = \mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} [\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2] + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar} \hat{p}_y, \tag{3.14}$$

basta utilizar as relações (3.13) para derivar seguinte a matriz:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\Psi(x,y) &\rightarrow \hat{H}\Psi_n^m = \left[\mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5) \frac{4}{a^2} \right] \Psi_n^{(m)} \\
 &+ \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} - \frac{i\mathcal{A}\Gamma_1}{2a} \right] \Psi_{n+1}^{(m)} + \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} - \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} \right] \Psi_n^{(m+1)} \\
 &+ \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} + \frac{i\mathcal{A}\Gamma_1}{2a} \right] \Psi_{n-1}^{(m)} + \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} + \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} \right] \Psi_n^{(m-1)}.
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

O campo magnético é reinserido no modelo por um termo Zeeman e uma fase de Peierls, que transforma a interação entre vizinhos segundo a fórmula

$$\tilde{t}_{ij} = t_{ij} \exp[ie\mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \tag{3.16}$$

Chegamos finalmente aos termos

$$\begin{aligned}
 h &\equiv H_{n,n}^{m,m} = \mathcal{C}\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5) \frac{4}{a^2} + \frac{\mu_B B_0}{2} \Gamma_g^z, \\
 u_y &\equiv H_{n,n}^{m,m'} = \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} \mp \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a}, \\
 u_x &\equiv H_{n,n'}^{m,m} = \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} \mp \frac{i\mathcal{A}\Gamma_1}{2a} \right] e^{\pm ima^2(eB_0/\hbar)},
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

onde $u_{x(y)}$ relaciona sítios vizinhos na direção $x(y)$ e h é a energia no sítio. Diagonalizando a matriz Hamiltoniana, obtemos as autoenergias e autoestados dos elétrons e buracos do sistema.

3.3.3 Tira de HgTe/CdTe: solução numérica

Partindo do modelo contínuo na ausência de campo magnético, com Γ_1 , Γ_2 , Γ_5 e Γ_g^z matrizes (4×4) escritas na base $\{|E \uparrow\rangle, |H \uparrow\rangle, |E \downarrow\rangle, |H \downarrow\rangle\}$, temos Hamiltoniano BHZ:

$$\hat{H} = \mathcal{C}\mathbb{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - \frac{(\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\mathcal{A}\Gamma_2}{\hbar} \hat{p}_y, \quad (3.18)$$

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

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

Para uma tira de HgTe/CdTe, onde o comprimento do material é muito maior que sua largura, podemos utilizar condições de contorno periódicas na direção x . Discretizamos a Hamiltoniana (3.18) para $p_x = \hbar k_x$ constante, usando as substituições (3.13) para p_y e p_y^2 , onde $y = ma$:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi_m &= \mathcal{M}\Gamma_5\Psi_m - \frac{(\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{\hbar^2} \left[\left(\hbar k_x - \frac{\hbar m a}{l_B^2} \right)^2 \Psi_m - \frac{\hbar^2}{a^2} (\Psi_{m+1} - 2\Psi_m + \Psi_{m-1}) \right] \\ &+ \frac{\mathcal{A}\Gamma_1}{\hbar} \left(\hbar k_x - \frac{\hbar m a}{l_B^2} \right) \Psi_m - \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} (\Psi_{m+1} - \Psi_{m-1}) + \frac{\mu_B B}{2} \Gamma_g^z. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Isso implica

$$\begin{aligned} H_{m,m} &= \left[\mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5) \left(\frac{2}{a^2} + k_x^2 - \frac{2eBk_x m a}{\hbar} + \frac{e^2 B^2 m^2 a^2}{\hbar^2} \right) + \mathcal{A}\Gamma_1 \left(k_x - \frac{m a e B}{\hbar} \right) + \frac{\mu_B B}{2} \Gamma_g^z \right] \\ H_{m-1,m} &= \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} - \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} \right] \\ H_{m+1,m} &= \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbb{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} + \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} \right] \end{aligned}$$

onde podemos encontrar os autoestados do Hamiltoniano pela diagonalização da matriz $[H]_{M \times M}$. Os autovetores descrevem a função de onda dos portadores de carga ao longo da direção “ y ”. Quanto menor o parâmetro de rede a_0 , melhores os resultados obtidos. O tempo de computação, entretanto, aumenta com M^3 , nos levando a uma limitação prática nos cálculos numéricos. A aproximação de onda plana na direção “ x ” será melhor quanto maior a dimensão L do material.

Este método nos permite encontrar as energias do sistema em função dos parâmetros $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{D}$ e $\mathcal{M}$ do Hamiltoniano de forma simples. Apesar de não ser possível variá-los de forma independente em um dispositivo real, uma vez que $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{D}$ e $\mathcal{M}$ são dependentes da espessura do material confinado, faremos este estudo numérico a fim de entender o impacto de cada termo no espectro do sistema. Estudaremos a implicação física de cada um deles nas páginas seguintes.

Significado físico do parâmetro $\mathcal{A}$

Analisando (3.18), nota-se que o parâmetro $\mathcal{A}$ acopla estados do tipo $|E\rangle$ com estados do tipo $|H\rangle$ de mesmo spin, tanto dentro de um mesmo sítio quanto com seus primeiros vizinhos. Ao traçarmos o espectro para diversos valores do parâmetro, como ilustrado nos gráficos da Figura 3.8, verifica-se que um maior acoplamento entre elétrons e buracos causa o afastamento das bandas de energia entre si. Isto é, $\Delta E = E_{n+1} - E_n$ aumenta com $\mathcal{A}$. Outro efeito observado é a redução da massa efetiva dos portadores de carga, uma vez que as bandas aumentam sua concavidade.

Figura 3.8: Relação de dispersão para o material variando os valores do parâmetro $\mathcal{A}$, com $\mathcal{B} = -686 \text{ meV nm}^2$, $\mathcal{C} = 0 \text{ meV}$, $\mathcal{D} = -512 \text{ meV nm}^2$ e $\mathcal{M} = -10 \text{ meV}$ fixos. O aumento de $\mathcal{A}$, que descreve o acoplamento entre elétrons e buracos de mesmo spin, causa o afastamento das bandas de energia entre si e a diminuição da massa efetiva dos portadores de carga.

Significado físico do parâmetro $\mathcal{B}$

Segundo a relação (3.18), $\mathcal{B}$ adiciona uma energia no sítio, com sinais trocados para estados do tipo $|E\rangle$ e $|H\rangle$. Este parâmetro também acopla elétrons com elétrons e buracos com buracos entre sítios vizinhos. O estudo numérico de $\mathcal{B}$ mostra que sua variação tem pouco impacto nos estados do bulk. Os estados de borda com dispersão linear, por sua vez, se abrem e aproximam mais da banda de valência à medida que aumentamos a magnitude deste acoplamento. O algoritmo numérico apresenta problemas de convergência para valores do parâmetro distantes do intervalo $[-1500; -600]$ meV nm^2 .

Figura 3.9: Relação de dispersão para o material variando os valores do parâmetro $\mathcal{B}$, com $\mathcal{A} = -364.5$ meV nm , $\mathcal{C} = 0$ meV , $\mathcal{D} = -512$ meV nm^2 e $\mathcal{M} = -10$ meV fixos. A variação de $\mathcal{B}$ tem pouca influência nos estados do bulk, mas afeta os estados de borda, deixando-os mais abertos e próximos da banda de valência à medida que aumentamos a magnitude do parâmetro.

Significado físico do parâmetro $\mathcal{C}$

A quantidade $\mathcal{C}$ é a única que não tem relação com a construção do dispositivo: é possível variar este parâmetro de forma independente dos demais. Pela equação (3.18), trata-se de uma energia somada em cada sítio, e pode ser interpretado como uma tensão de gate. De fato, ao analisarmos os espectros ilustrados na Figura 3.10, vemos que a variação deste parâmetro apenas desloca para cima ou para baixo rigidamente os valores de energia.

Figura 3.10: Relação de dispersão para o material variando os valores do parâmetro $\mathcal{C}$, com $\mathcal{A} = -364.5 \text{ meV nm}$, $\mathcal{B} = -686 \text{ meV nm}^2$, $\mathcal{D} = -512 \text{ meV nm}^2$ e $\mathcal{M} = -10 \text{ meV}$ fixos. O parâmetro $\mathcal{C}$ desloca rigidamente os valores de energia do espectro, podendo ser interpretado como uma tensão de gate.

Significado físico do parâmetro $\mathcal{D}$

Segundo a relação (3.18), $\mathcal{D}$ adiciona uma energia no sítio, com mesmo sinal, para estados do tipo $|E\rangle$ e $|H\rangle$. Este parâmetro também acopla elétrons com elétrons e buracos com buracos entre sítios vizinhos. De forma similar ao obtido para o parâmetro $\mathcal{B}$, seu estudo numérico mostra que $\mathcal{D}$ tem pouco impacto nos estados do bulk: há um ligeiro afastamento entre as bandas de condução e um ligeiro achatamento das bandas de valência com sua variação. Os estados de borda, por sua vez, se fecham de maneira significativa e se afastam cada vez mais da banda de valência à medida que aumentamos a magnitude de $\mathcal{D}$.

Figura 3.11: Relação de dispersão para o material variando os valores do parâmetro $\mathcal{D}$, com $\mathcal{A} = -364.5$ meV nm , $\mathcal{B} = -686$ meV nm^2 , $\mathcal{C} = 0$ meV e $\mathcal{M} = -10$ meV fixos. A variação de $\mathcal{D}$ tem pouca influência nos estados do bulk, mas afeta os estados de borda, deixando-os mais fechados e distantes da banda de valência à medida que aumentamos a magnitude do parâmetro.

Significado físico do parâmetro $\mathcal{M}$

Este parâmetro possui importante significado físico: $\mathcal{M}$ é conhecido como **termo de massa**. Seu valor equivale ao tamanho do gap entre os estados $|E1\rangle$ e $|H1\rangle$ do bulk, e é positivo para isolantes triviais - caso onde não surgem estados de borda - e negativo para os isolantes topológicos. Matematicamente, verifica-se que o valor deste parâmetro é somado como uma energia em cada sítio, com sinais trocados para estados do tipo elétron e do tipo buraco. Resultados obtidos para diversos valores de $\mathcal{M}$ estão ilustrados nos gráficos da Figura 3.12.

Figura 3.12: Relação de dispersão para o material variando os valores do parâmetro $\mathcal{M}$, com $\mathcal{A} = -364.5$ meV nm, $\mathcal{B} = -686$ meV nm², $\mathcal{C} = 0$ meV e $\mathcal{D} = -306$ meV nm² fixos. $\mathcal{M}$ equivale à largura do gap entre os estados $|E1\rangle$ e $|H1\rangle$ do bulk, sendo positivo para isolantes triviais e negativo para os isolantes topológicos.

Neste trabalho são utilizados para o estudo do material no regime spin Hall quântico os valores $\mathcal{A} = 364.5 \text{ meV nm}$, $\mathcal{B} = -686 \text{ meV nm}^2$, $\mathcal{D} = -512 \text{ meV nm}^2$ e $\mathcal{M} = -10 \text{ meV}$, que correspondem à espessura $d = 7 \text{ nm}$ de HgTe confinado. Os resultados no regime de isolante usual foram obtidos para os parâmetros $\mathcal{A} = 387.0 \text{ meV nm}$, $\mathcal{B} = -480 \text{ meV nm}^2$, $\mathcal{D} = -306 \text{ meV nm}^2$ e $\mathcal{M} = 9 \text{ meV}$, correspondendo à espessura $d = 5.5 \text{ nm}$ [21]. O parâmetro $\mathcal{C}$ corresponde a uma tensão de gate, tomada por $\mathcal{C}=0$ como padrão, mas variada ao longo do trabalho para simular junções n-X-n (Seção 4.4). Outros valores poderiam ser utilizados sem prejuízo das análises qualitativas ou quantitativas. Optamos por estes parâmetros para facilitar a comparação dos nossos resultados com a literatura [21, 22]. Em todos os cálculos, as tiras de material estão confinadas entre paredes rígidas (aproximação “*hard wall*”).

O método das diferenças finitas também permite a variação da largura w da tira de HgTe/CdTe nas simulações de forma simples. No gráfico da Figura 3.13, estão representados os estados de borda na vizinhança de $\vec{k}=0$ para diversos valores de w . Nota-se que a diminuição das dimensões do dispositivo causa uma abertura de gap entre os estados de borda. Para $w=100 \text{ nm}$, esta distância em $\vec{k}=0$ é de $\Delta \approx 3.5 \text{ meV}$, enquanto para $w=200 \text{ nm}$, o gap é de 0.44 meV . A tira de largura $w=1000 \text{ nm}$ não apresenta diferenças de energia entre os estados de borda até a quinta casa decimal. Para efeitos práticos, este sistema não apresenta gap entre os estados topologicamente protegidos.

Figura 3.13: Estados de borda do material na vizinhança de $\vec{k} = 0$ para larguras $w=200\text{nm}$ (azul) e $w=1000\text{nm}$ (preto), mantendo fixa a espessura d de HgTe, para os parâmetro ideais definidos. A diminuição das dimensões do dispositivo causa uma abertura de gap entre os estados de borda.

Na Figura 3.13, nossos resultados foram comparados à solução analítica para uma tira de

HgTe/CdTe, obtida por Zhou e colaboradores [22]. As energias obtidas para os estados de borda são compatíveis com o valor analítico, dentro do erro numérico.

4 *Transporte eletrônico: Método das Funções de Green*

Transporte eletrônico é um tópico de grande relevância no estudo dos isolantes topológicos. As aplicações tecnológicas destes materiais envolvem a transmissão de elétrons e manipulação de seus spins, seja para a construção de dispositivos, seja no tratamento de informação quântica. A própria definição do estado topológico e sua descoberta estão diretamente relacionados às propriedades de transporte do sistema.

O efeito Hall quântico de spin, observado nos poços de HgTe/CdTe e demais TI's bidimensionais, trata de como os portadores de carga transitam pelo material. Como discutido no Capítulo 2.2.3, no regime topológico há o surgimento de estados de borda contrapropagantes, denominados estados helicais. No efeito Hall quântico usual, as bordas comportam estados quirais, onde apenas portadores de carga com determinado spin podem transitar, numa direção bem definida.

Para a aplicação desses efeitos, propriedades como a condutância do material e o estudo das correntes locais se fazem necessários. Nas seções seguintes, são discutidas as teorias de transporte e os métodos matemáticos utilizados neste trabalho.

O método das matrizes de Green [23], adaptado aos isolantes topológicos em colaboração com o Prof. Dr. Caio Lewenkopf e o Dr. Leandro Lima, do Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense, foi utilizado neste trabalho para o cálculo de propriedades de transporte.

Neste modelo, o espaço é representado por uma rede $N \times M$, conforme ilustrado no exemplo da Figura 4.1, onde $N = 10$ e $M = 5$. A amostra é ligada a dois contatos, um atuando como fonte de elétrons e o outro como coletor. Os sítios sobre a fonte e o coletor são representados pelo intervalo $n = (-\infty, 0]$ para o contato L, da esquerda, e pelo intervalo $n = [N+1, +\infty)$ para o contato R, da direita.

Considerando que a única interação relevante se dá entre primeiros vizinhos, escrevemos o

Figura 4.1: Exemplo de sistema representado por uma rede quadrada $N \times M$, para $N=10$ e $M=5$. Os sítios que descrevem os contatos são dados pelos intervalos $(-\infty, 0]$ e $[N+1, +\infty)$.

Figura 4.2: Sistema representado por uma rede quadrada $N \times M$, para $N=10$ e $M=5$. Exemplos de interações do tipo t_{ij} dentro de uma mesma fatia e u_{ij} , entre fatias, para a construção do Hamiltoniano.

Hamiltoniano do material (porção central do sistema, de sítios 1 a N) como a seguinte matriz tridiagonal no espaço das coordenadas

$$H_C = \begin{pmatrix} h_1 & u_{12} & 0 & 0 & \dots \\ u_{21} & h_2 & u_{23} & 0 & \dots \\ 0 & u_{32} & h_3 & u_{34} & \\ 0 & 0 & u_{43} & h_4 & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}_{NM \times NM}, \quad (4.1)$$

onde os blocos h_n descrevem cada fatia n e os blocos $u_{nn'}$ descrevem a relação entre duas fatias:

$$h_n = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & & & \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} & & \\ & t_{32} & t_{33} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & t_{MM} \end{pmatrix}_{M \times M} \quad u_{nn'} = \begin{pmatrix} u_{11} & & & & \\ & u_{22} & & & \\ & & u_{33} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & u_{MM} \end{pmatrix}_{M \times M}$$

As matrizes h_n devem ser tridiagonais, onde os termos $t_{m,m\pm 1}$ quantificam a interação do sítio m com seu sucessor e seu antecessor, dentro da fatia n . Os termos diagonais t_{mm} são as energias no próprio sítio m . As matrizes $u_{nn'}$ devem ser diagonais, uma vez que apenas sítios com mesmo índice se relacionam entre fatias diferentes. Tais interações estão ilustradas na Figura 4.2, segundo nosso exemplo para $N=10$ e $M=5$.

O Hamiltoniano H_{full} , que descreve todo o sistema, se dá pelo acoplamento dos contatos semi-infinitos L e R ao Hamiltoniano H_C (4.1) do material isolado

$$H_{full} = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & & \\ & h_{-1} & U_{-1,0} & & & & \\ & U_{0,-1} & h_0 & U_{0,1} & & & \\ & & U_{1,0} & H_C & U_{N,N+1} & & \\ & & & U_{N+1,N} & h_{N+1} & U_{N+1,N+2} & \\ & & & & U_{N+2,N+1} & h_{N+2} & \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

As matrizes $U_{n,n'}$ descrevem a interação dos sítios sobre os contatos com seus vizinhos.

Microscopicamente, podemos escrever a corrente eletrônica em uma região i como

$$I_i = -e \langle \dot{N}_i \rangle, \quad (4.3)$$

onde e é a carga elementar e N_i é o operador número de elétrons no sítio i . De fato, assim como na teoria macroscópica, a variação da média de cargas no tempo equivale à corrente: $I = \Delta q / \Delta t$.

Usando $i\hbar \dot{N}_i = \langle [N_i, H] \rangle$ e o formalismo de segunda quantização para os operadores N_i e H , chegamos à seguinte fórmula para transmissão entre dois sítios:

$$T_{ij}^\alpha(E) = -2\Im \left\{ (G^r \Gamma_\alpha G^a)_{ij} t_{ij} \right\}, \quad (4.4)$$

sendo as matrizes Γ_α e as matrizes de Green retardada G^r e avançada G^a definidas, respectivamente, por (4.5), (4.6) e (4.7), onde $\Sigma = \Sigma_L + \Sigma_R$ é a interação entre a amostra e os contatos

$$\Gamma_\alpha(E) \equiv i \left[\Sigma_\alpha^r - (\Sigma_\alpha^r)^\dagger \right], \quad (4.5)$$

$$G^r \equiv [(E + i\eta)\mathbb{I} - H - \Sigma]^{-1}, \quad (4.6)$$

$$G^a \equiv [(E - i\eta)\mathbb{I} - H - \Sigma]^{-1}, \quad (4.7)$$

$$\Sigma_\alpha = V_{C\alpha} G_\alpha V_{\alpha C}, \quad (4.8)$$

com $\alpha = L, R$, referente ao contato da esquerda ou da direita.

A transmissão total é dada pelo somatório de todas as transmissões locais entre dois contatos, resultando

$$T_{LR}(E) = \text{Tr} \{ \Gamma_L G^r \Gamma_R G^a \}. \quad (4.9)$$

Para calcular as grandezas de interesse ao estudo de transporte no material, precisamos determinar, portanto, quais são as matrizes de Green do sistema e as interações Σ . Em uma rede quadrada com interação apenas entre primeiros vizinhos, como na ilustração da Figura 4.1, teríamos a seguinte representação matricial da interação entre contato e amostra:

$$V_{LC} = \begin{pmatrix} [V_{01}]_{M \times M} & 0_{M \times M} & 0_{M \times M} & \dots & 0_{M \times M} \end{pmatrix},$$

$$\Sigma_L = V_{CL} G_L V_{LC} \quad , \quad V_{CL} = V_{LC}^\dagger \quad , \quad V_{01} = V_{10}^\dagger \quad ,$$

$$\Rightarrow \Sigma_L = \begin{pmatrix} V_{10} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (G_{00}) \begin{pmatrix} V_{01} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Rightarrow \Sigma_L = \begin{pmatrix} V_{10}G_{00}V_{01} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}_{N \times N}. \quad (4.10)$$

Portanto, o único termo não nulo de Γ_L é $\Gamma_{1,1}^{(L)}$, de dimensão $M \times M$. Analogamente, teremos para Γ_R o termo não nulo $\Gamma_{N,N}^{(R)}$. A transmissão da esquerda para a direita é dada, neste caso, por

$$\begin{aligned} T_{LR}(E) &= Tr \{ \Gamma_L G^r \Gamma_R G^a \}, \\ T_{LR}(E) &= Tr \left[\begin{pmatrix} \Gamma_1 G_{1,1}^r & \Gamma_1 G_{1,2}^r & \dots & \Gamma_1 G_{1,N}^r \\ 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 \\ \Gamma_N G_{N,1}^a & \Gamma_N G_{N,2}^a & \dots & \Gamma_N G_{N,N}^a \end{pmatrix} \right], \\ T_{LR}(E) &= Tr \begin{pmatrix} \Gamma_1 G_{1,N}^r \Gamma_N G_{N,1}^a & \Gamma_1 G_{1,N}^r \Gamma_N G_{N,2}^a & \dots & \Gamma_1 G_{1,N}^r \Gamma_N G_{N,N}^a \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix}, \\ \Rightarrow T_{LR}(E) &= Tr \{ \Gamma_1 G_{1,N}^r \Gamma_N G_{N,1}^a \}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Da mesma forma, para a transmissão da direita para a esquerda,

$$\begin{aligned} T_{RL}(E) &= Tr \{ \Gamma_R G^r \Gamma_L G^a \}, \\ T_{RL}(E) &= Tr \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 \\ \Gamma_N G_{N,1}^r & \Gamma_N G_{N,2}^r & \dots & \Gamma_N G_{N,N}^r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 G_{1,1}^a & \Gamma_1 G_{1,2}^a & \dots & \Gamma_1 G_{1,N}^a \\ 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix} \right], \\ T_{RL}(E) &= Tr \begin{pmatrix} 0 & & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ \Gamma_N G_{N,1}^r \Gamma_1 G_{1,1}^a & \Gamma_N G_{N,1}^r \Gamma_1 G_{1,2}^a & \dots & \Gamma_N G_{N,1}^r \Gamma_1 G_{1,N}^a \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\Rightarrow T_{RL}(E) = Tr \{ \Gamma_N G_{N1}^r \Gamma_1 G_{1N}^a \}. \quad (4.12)$$

As matrizes de Green são calculadas pelas relações (4.6) e (4.7). Os estados no sistema poderiam ser determinados pela simples diagonalização do Hamiltoniano completo H_{full} . Não é possível, no entanto, trabalhar com matrizes infinitas. As próximas seções descrevem dois métodos para obter tais resultados: o usual, que pode ser usado para calcular a transmissão total através da amostra (4.9) e o recursivo, que possibilita também o cálculo das correntes locais (4.4), isto é, como se dá o fluxo de elétrons a cada sítio do material.

Em ambos os casos, deverá ser contornado o fato dos contatos serem modelados como semi-infinitos. Para calcular as matrizes de Green nas regiões L e R, utilizamos o método da decimação [24]. Trata-se de um algoritmo recursivo que converge para as funções de Green dos contatos em um número finito de iterações.

4.1 Matrizes de Green: método usual

Para calcular as matrizes de Green do sistema é necessário conhecer a interação $\Sigma_\alpha = V_{C\alpha} G_\alpha V_{\alpha C}$ entre os contatos e o material. Os efeitos gerados por esta interface podem ser adicionados à primeira fatia da região central, conforme ilustrado na Figura 4.3.

Figura 4.3: Material representado por uma rede quadrada $N \times M$, para $N=10$ e $M=5$. A interação com os contatos está incluída nos termos Σ_1 e Σ_N .

Pelo algoritmo de decimação [24], obtemos as funções de Green dos contatos, G_L e G_R ,

e escrevemos os termos Σ . O Hamiltoniano aproximado do sistema é dado agora pela matriz $NM \times NM$:

$$H = \begin{pmatrix} h_1 + \Sigma_1 & u_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ u_{21} & h_2 & u_{23} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & u_{32} & h_3 & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & \ddots & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & h_{N-2} & u_{N-2,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & u_{N-1,N-2} & h_{N-1} & u_{N-1,N} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & u_{N,N-1} & h_N + \Sigma_N \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

As matrizes de Green são obtidas numericamente, pelas inversões

$$G^r = [(E + i\eta)\mathbb{I} - H]^{-1},$$

$$G^a = [(E - i\eta)\mathbb{I} - H]^{-1}.$$

Com tais resultados, calculamos a transmissão entre dois contatos $T_{LR} = \text{Tr} \{ \Gamma_L G^r \Gamma_R G^a \}$. O tempo de computação neste método é proporcional a $(NM)^3$, referente à inversão de uma matriz $NM \times NM$.

4.2 Matrizes de Green: método recursivo

No método recursivo para obtenção das matrizes de Green, as interações entre as fatias do material são analisadas uma a uma. O efeito dos contatos no sistema deve ser calculado e inserido na primeira fatia, como ilustrado na Figura 4.4.

Neste perspectiva, acoplando apenas a interação contato-amostra da esquerda à primeira fatia do material, temos

$$G = [E\mathbb{I} - H_C]^{-1}, \quad (4.14)$$

$$H_C = H_0 + V, \quad (4.15)$$

Figura 4.4: (esq.) Ilustração do contato semi-infinito ligado à amostra (dir.) após a primeira recursão, o efeito Σ do contato é somado na fatia 1 do material.

$$H_0 = \begin{pmatrix} h_1 + \Sigma_1 & 0 & & & \\ 0 & h_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & h_{N-1} & U_{N-1,N} \\ & & & U_{N,N-1} & h_N \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & u_{12} & & & \\ u_{21} & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Supondo que $G_0 = [E\mathbb{I} - H_0]^{-1}$ é conhecida, e substituindo na equação (4.14):

$$\begin{aligned} G^{-1} &= (E - i\eta)\mathbb{I} - H_0 - V, \\ \Rightarrow G^{-1} &= (G_0)^{-1} - V, \\ \Rightarrow GG^{-1} &= G(G_0)^{-1} - GV, \\ \Rightarrow \mathbb{I} &= G(G_0)^{-1} - GV, \\ \Rightarrow G_0 &= G(G_0)^{-1}G_0 - GVG_0, \\ \Rightarrow G_0 &= G - GVG_0, \\ G &= G_0 + GVG_0. \end{aligned} \tag{4.16}$$

A relação (4.16) é conhecida como Equação de Dyson. A partir dela, a matriz G é obtida recursivamente: com G_0 dado, seu valor é atualizado até que se atinja a convergência.

De forma genérica,

$$G_{mn} = G_{mn}^{(0)} + \sum_{k,l} G_{mk}^{(0)} V_{kl} G_{ln}. \quad (4.17)$$

Lembrando que $G_{01}^{(0)}$ se anula e utilizando a relação (4.17) para obter G_{11} , a função de Green que descreve a primeira fatia do material, e G_{01} , que descreve a relação entre o contato da esquerda e a amostra, temos:

$$\begin{aligned} G_{11} &= G_{11}^{(0)} + \cancel{G_{10}^{(0)} V_{01} G_{11}} + G_{11}^{(0)} V_{10} G_{01}, \\ G_{01} &= \cancel{G_{01}^{(0)}} + G_{00}^{(0)} V_{01} G_{11} + \cancel{G_{01}^{(0)} V_{10} G_{01}}, \\ \implies G_{11} &= G_{11}^{(0)} + G_{11}^{(0)} V_{10} G_{00}^{(0)} V_{01} G_{11}, \end{aligned}$$

onde $\Sigma_1 = V_{10} G_{00}^{(0)} V_{01}$ e $G_{11}^{(0)} = \mathcal{G}_1$:

$$\begin{aligned} \implies G_{11} &= \mathcal{G}_1 + \mathcal{G}_1 \Sigma_1 G_{11}, \\ \implies (\mathbb{I} - \mathcal{G}_1 \Sigma_1) G_{11} &= \mathcal{G}_1, \\ \implies G_{11} &= (\mathbb{I} - \mathcal{G}_1 \Sigma_1)^{-1} \mathcal{G}_1, \\ \implies G_{11} &= (\mathbb{I} - \mathcal{G}_1 \Sigma_1)^{-1} (\mathcal{G}_1^{-1})^{-1}, \\ \implies G_{11} &= [\mathcal{G}_1^{-1} (\mathbb{I} - \mathcal{G}_1 \Sigma_1)]^{-1}, \\ \implies G_{11} &= (\mathcal{G}_1^{-1} - \Sigma_1)^{-1}, \\ G_{11}^{(1)} &= \left(E\mathbb{I} - h_1 - V_{10} G_{00}^{(0)} V_{01} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Seguindo este raciocínio, anexamos agora a segunda fatia do material, conforme ilustrado na Figura 4.5.

Pelo mesmo processo realizado entre as equações (4.17) e (4.18), chegamos à relação

$$G_{22}^{(2)} = \left(E\mathbb{I} - h_2 - V_{21} G_{11}^{(1)} V_{12} \right)^{-1}. \quad (4.19)$$

E sucessivamente anexando as fatias, temos a relação geral

$$G_{nn}^{(n)L} = \left(E\mathbb{I} - h_n - V_{n,n-1} G_{n-1,n-1}^{(n-1)L} V_{n-1,n} \right)^{-1}. \quad (4.20)$$

A última recursão, que liga a amostra ao contato R, da direita, se dá de forma diferente. Utilizando um sistema 3×3 , temos, conforme ilustrado na Figura 4.6:

Figura 4.5: (esq.) primeira recursão: as matrizes de Green possuem os efeitos do contato L e da primeira fatia, estando desconectadas do restante do sistema (dir.) segunda recursão: anexação da segunda fatia.

$$G^{(0)} = \begin{pmatrix} G_{N-1,N-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{G}_N & 0 \\ 0 & 0 & G_{N+1,N+1} \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 0 & V_{N-1,N} & 0 \\ V_{N,N-1} & 0 & V_{N,N+1} \\ 0 & V_{N+1,N} & 0 \end{pmatrix}$$

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} V G$$

Utilizando $G_{x,N}^{(N-1)L} = \mathcal{G}_x$, com $x = N, N \pm 1$, e (4.17), calculamos $G_{x,N}^{(N)L}$:

$$\begin{aligned} G_{N-1,N}^{(N)L} &= \cancel{G_{N-1,N}^{(N-1)L}} + G_{N-1,N-1}^{(N-1)L} V_{N-1,N} G_{N,N}^{(N)L}, \\ G_{N+1,N}^{(N)L} &= \cancel{G_{N+1,N}^{(N-1)L}} + G_{N+1,N+1}^{(N-1)L} V_{N+1,N} G_{N,N}^{(N)L}, \\ G_{N,N}^{(N)L} &= G_{N,N}^{(N-1)L} + G_{N,N}^{(N)L} V_{N,N-1} G_{N-1,N}^{(N)L} + G_{N,N}^{(N)L} V_{N,N+1} G_{N+1,N}^{(N)L}, \\ \implies G_{N,N}^{(N)L} &= \mathcal{G}_N + \mathcal{G}_N V_{N,N-1} \mathcal{G}_{N-1} V_{N-1,N} G_{N,N} + \mathcal{G}_N + \mathcal{G}_N V_{N,N+1} \mathcal{G}_{N+1} V_{N+1,N} G_{N,N}. \end{aligned}$$

Figura 4.6: Exemplo para $M=5$ da última recursão, onde um sistema 3×3 é utilizado para acoplar o material (à esquerda) à sua última fatia (ao centro) e ao contato R.

Por ser a última recursão, temos agora que $G_{N,N}^{(N)L} \equiv G_{N,N}$:

$$\begin{aligned}
 G_{N,N} &= \mathcal{G}_N + \mathcal{G}_N \Sigma_{N-1} G_{N,N} + \mathcal{G}_N + \mathcal{G}_N \Sigma_{N+1} G_{N,N}, \\
 \implies \mathcal{G}_N &= (\mathbb{I} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N-1} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N+1}) G_{N,N}, \\
 \implies G_{N,N} &= (\mathbb{I} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N-1} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N+1})^{-1} \mathcal{G}_N, \\
 \implies G_{N,N} &= [\mathcal{G}_N^{-1} (\mathbb{I} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N-1} - \mathcal{G}_N \Sigma_{N+1})]^{-1}, \\
 \implies G_{N,N} &= (\mathcal{G}_N^{-1} - \Sigma_{N-1} - \Sigma_{N+1})^{-1}, \\
 G_{N,N} &= (E\mathbb{I} - h_N - \Sigma_{N-1} - \Sigma_{N+1})^{-1}, \tag{4.21}
 \end{aligned}$$

onde $G_{N,N}$ é a função de Green “completa” que descreve a transmissão através da amostra, levando em conta todos os efeitos internos e de interação com os dois contatos.

4.3 Correntes locais

Temos o interesse de obter as correntes locais no interior do material, isto é, analisar como se dá a transmissão de cargas sítio a sítio. A relação (4.23) para $G_{n,n}^{(n)L}$ descreve o sistema na fatia “ n ”, mas apenas leva em consideração os efeitos das cargas que chegam pela esquerda. Para obter a função de Green completa $G_{n,n}$, é preciso calcular os efeitos das cargas vindas da outra direção, conforme ilustrado na Figura 4.7:

Figura 4.7: Para o cálculo das correntes locais na fatia n , as recursões devem ser feitas pela esquerda até $n-1$ e pela direita até $n+1$, resultando em um sistema 3×3 para acoplar g_n , $G_{n-1,n-1}^{(n-1)L}$, e $G_{n+1,n+1}^{(N-n)R}$.

De forma análoga ao que foi feito para o contato L, são feitas recursões partindo da direita, onde é possível chegar na relação

$$G_{n,n}^{(n)R} = \left(E\mathbb{I} - h_n - V_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{(N-n)R} V_{n+1,n} \right)^{-1}. \quad (4.22)$$

Para obter $G_{n,n}$ completa, a última recursão é feita utilizando um sistema matricial 3×3 , como no processo entre as equações (4.20) e (4.21):

$$G_{n,n}^{(n-1)} = \begin{pmatrix} G_{n-1,n-1}^{(n-1)L} & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{G}_n & 0 \\ 0 & 0 & G_{n+1,n+1}^{(N-n)R} \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 0 & V_{n-1,n} & 0 \\ V_{n,n-1} & 0 & V_{n,n+1} \\ 0 & V_{n+1,n} & 0 \end{pmatrix}$$

$$G_{n,n} = G_{n,n}^{(n-1)} + G_{n,n}^{(n-1)} V G_{n,n},$$

$$\Rightarrow G_{n,n} = \left(E\mathbb{I} - h_n - V_{n,n-1} \mathcal{G}_{n-1}^L V_{n-1,n} - V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n+1}^R V_{n+1,n} \right)^{-1}. \quad (4.23)$$

Com esses resultados, calculamos as correntes locais $T_{ij}^\alpha(E) = -2\Im \left\{ (G^r \Gamma_\alpha G^a)_{ij} t_{ij} \right\}$. O tempo de computação deste método é proporcional a $2N^2 M^3$, correspondente a $2N^2$ inversões de matrizes $M \times M$.

4.4 Transporte eletrônico em poços de HgTe/CdTe

As equações apresentadas na Seção 4 são gerais, podendo ser aplicadas a qualquer material. Para calcular transmissões e correntes locais em poços de HgTe/CdTe, é necessário descrever as relações h_{mm} , $h_{m,m\pm 1}$ e u_{mm} neste sistema. Conforme obtido na Seção 3.3 por diferenças finitas, o Hamiltoniano do material é dado por:

$$\begin{aligned} h &\equiv H_{n,n}^{m,m} = C\mathbf{1} + \mathcal{M}\Gamma_5 - (\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5) \frac{4}{a^2} + \frac{\mu_B B_0}{2} \Gamma_g^z \\ u_y &\equiv H_{n,n}^{m,m'} = \frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} \mp \frac{i\mathcal{A}\Gamma_2}{2a} \\ u_x &\equiv H_{n,n'}^{m,m} = \left[\frac{(\mathcal{D}\mathbf{1} + \mathcal{B}\Gamma_5)}{a^2} \mp \frac{i\mathcal{A}\Gamma_1}{2a} \right] e^{\pm ima^2(eB_0/\hbar)} \end{aligned}$$

Onde h é a energia do sítio, u_y é a interação entre sítios vizinhos na direção $\hat{e}_y$ e u_x é a interação entre sítios vizinhos na direção $\hat{e}_x$. Na notação desenvolvida para o método das matrizes de Geen, temos, portanto:

$$h_{mm} \equiv h; \quad h_{m,m\pm 1} \equiv u_y; \quad u_{mm} \equiv u_x \quad (4.24)$$

Onde cada um dos termos h_{mm} , $h_{m,m\pm 1}$ e u_{mm} são matrizes 4×4 , escritas na base $\{|E \uparrow\rangle, |H \uparrow\rangle, |E \downarrow\rangle, |H \downarrow\rangle\}$. A matriz (4.13) do método FGF terá, para o material estudado, dimensão $4NM \times 4NM$. No método RGF, cada fatia n de HgTe/CdTe terá dimensão $4M \times 4M$.

A condutância de tiras de HgTe/CdTe e correntes locais no material foram obtidas pelo método das matrizes de Green com as relações (4.24), para diversos valores de campo magnético e largura da tira.

Diodos e transistores são componentes fundamentais para a construção da maioria dos dispositivos modernos. Por suas propriedades de transporte, são amplamente utilizados na eletrônica. Os isolantes topológicos possibilitam, com a existência de estados de borda helicais, manipular também o spin de seus portadores de carga. Nosso objetivo é entender o papel dos estados de borda nas propriedades de transporte de diferentes configurações, tais como junções n-p ou n-p-n.

O método das matrizes de Green nos possibilita somar potenciais locais em cada sítio. Desta forma, as junções estudadas foram simuladas aplicando um potencial de barreira V_G em uma região do material, enquanto as demais permaneciam inalteradas. O modelo das junções está ilustrado na Figura 4.8.

Figura 4.8: [esq.] Ilustração do material e contatos representados por uma rede quadrada com $N=10$ e $M=5$. A região central do material é dopada com um potencial V_G , simulando uma junção n-TI-n para portadores de carga com energia de Fermi E_F . [dir.] Casos retratando (a) uma junção do tipo n-n'-n, (b) uma junção do tipo n-TI-n e (c) uma junção do tipo n-p-n. Créditos: Gusev et al. [27]

A energia de Fermi dos portadores de carga e a tensão de gate V_G determinam o tipo da junção simulada. Neste trabalho, estudamos sistemas n-n'-n, n-TI-n e n-p-n. Nossos resultados foram comparados com experimentos recentes, disponíveis na literatura [27], e são apresentados nos próximos capítulos.

5 *Tiras de HgTe/CdTe no regime Hall quântico de spin*

Analizamos a seguir tiras de HgTe/CdTe de larguras $w = 100, 200, 500$ e 1000nm , comprimento $L = 1000\text{nm}$, e espessuras de HgTe $d = 7.00\text{nm}$ (caso topológico) e $d = 5.50\text{nm}$ (caso trivial), com w , L e d como na Figura 5.1. Tais parâmetros foram escolhidos de forma a facilitar a comparação de nossos resultados com a literatura [21]. Em nossos cálculos, foi considerada para o sistema a condição de contorno de *hard wall*.

Figura 5.1: Diagrama de um isolante topológico: poço quântico do tipo III de HgTe/CdTe. Em cinza, o telureto de mercúrio, em branco, o telureto de cádmio. As dimensões relevantes utilizadas no estudo do sistema são a espessura d de CdTe entre as camadas de HgTe, a largura w e o comprimento L da tira. Em vermelho e azul, ilustração de uma situação hipotética onde os portadores de carga com spin up e down, respectivamente, são transmitidos pelos estados de borda helicais.

Os espectros do sistema nos regimes de isolante topológico e isolante trivial, descritos pelo Hamiltoniano (3.7), foram obtidos pelo método das diferenças finitas e são apresentados nas Seções 5.1 e 6. Os resultados de transporte da Seção 5.2 foram calculados pelo método das

funções de Green recursivas no Cluster Água do High Performance Computing (HPC-USP). Será adotado o seguinte código de cores nas ilustrações: spin up $\rightarrow$ vermelho; spin down $\rightarrow$ azul.

5.1 Campo magnético nulo: estados de borda helicais

5.1.1 HgTe/CdTe como isolante trivial

A dispersão do sistema no regime de isolante trivial, com geometria representada pela Figura 5.1 e $d = 5.5\text{nm}$, é descrita pelo Hamiltoniano (3.7) com parâmetros $\mathcal{A} = 387.0\text{meV}\cdot\text{nm}$, $B = -480.0\text{meV}\cdot\text{nm}^2$, $C = 0$, $D = -306.0\text{meV}\cdot\text{nm}^2$, $\mathcal{M} = 9.0\text{meV}$ [21]. Utilizando o método apresentado na Seção 3.3.3, os espectros foram obtidos para as larguras $w = 200$ e 1000nm da tira.

Figura 5.2: (esq.) Relação de dispersão para uma tira de HgTe/CdTe de largura $w = 200\text{nm}$ no regime de isolante trivial. (dir.) Idem para $w = 1000\text{nm}$. Note que há um gap entre as bandas de valência e condução em ambos os casos, caracterizando sistemas isolantes. À medida que aumentamos a largura w da tira, os estados do bulk se aproximam do contínuo.

De fato, há um gap entre as bandas de valência e condução do material, caracterizando um isolante. Quanto maior a largura da tira, mais as energias do bulk se aproximam do contínuo, como é possível observar na comparação entre as dispersões de $w = 200$ e 1000nm , ilustrados nos gráficos da Figura 5.2. Nosso resultado para $w = 200\text{nm}$ é compatível ao obtido por Benedikt Scharf e colaboradores em [21], dentro do erro do método.

5.1.2 HgTe/CdTe como isolante topológico

A dispersão do sistema no regime spin Hall quântico, descrito pelo Hamiltoniano (3.7) com parâmetros $\mathcal{A} = 364.5 \text{ meV}\cdot\text{nm}$, $\mathcal{B} = -686.0 \text{ meV}\cdot\text{nm}^2$, $\mathcal{C} = 0$, $\mathcal{D} = -512.0 \text{ meV}\cdot\text{nm}^2$, $\mathcal{M} = -10.0 \text{ meV}$, foi calculada para diversas larguras w da tira:

Figura 5.3: Espectro de tiras de HgTe/CdTe para diversas larguras. Na ausência de campo magnético, os estados de borda, ao centro dos gráficos, são duplamente degenerados. À medida que a largura “ w ” da tira diminui, os estados do bulk se afastam e um gap se abre entre os estados de borda. Para $w = 100 \text{ nm}$ (a), o gap entre os estados de borda é de $\Delta E = 3.48 \text{ meV}$. Para $w = 500 \text{ nm}$ (c), ΔE é compatível com zero, dentro do erro numérico. O bulk se aproxima do contínuo à medida que w aumenta.

Tiras de largura menor resultam em estados do bulk mais separados entre si, como pode

ser observado na Figura 5.3. Para os parâmetros utilizados, equivalentes à espessura $d = 7.0\text{nm}$ de HgTe [21], surgem estados de dispersão aproximadamente linear preenchendo a região de gap entre as bandas de valência e condução. As tiras mais estreitas possuem gap entre esses novos estados: para $w = 100\text{nm}$, $\Delta E = 3.48\text{ meV}$; para $w = 200\text{nm}$, $\Delta E = 0.43\text{ meV}$. À partir de $w = 500\text{nm}$, ΔE está dentro do erro numérico compatível com zero. Na direção contrária, à medida que as larguras aumentam, as energias permitidas do bulk para determinado $\vec{k}$ se aproximam do contínuo.

Estudamos mais a fundo os estados de dispersão linear através de suas funções de onda. Os gráficos da Figura 5.4 ilustram uma tira de largura $w = 200\text{nm}$. O gap de $\Delta E = 0.43\text{ meV}$ em $\vec{k}=0$ faz com que as densidades de probabilidade de tais estados, representadas no quadro 5.4(b), sejam ligeiramente diferentes, embora qualitativamente equivalentes. Os portadores de carga nesses níveis de energia se acomodam nas bordas do material, e temos que $\Psi_{\uparrow}(\vec{k}=0)$ e $\Psi_{\downarrow}(\vec{k}=0)$ se sobrepõem. Os estados de energia ligeiramente maior podem ser encontrados na região central da tira, enquanto a probabilidade se anula para os estados de energia menor.

A função de onda para portadores de carga se movendo na direção positiva do eixo, cuja energia é representada pela cruz na Figura 5.4(a), mostra que os estados são degenerados para spin up e down, embora cada um deles se acumule em uma borda distinta do material. Os estados cujas energias estão representadas pelo triângulo têm suas funções de onda sobrepostas na região central, o que indica interação entre os estados. Tal efeito é relacionado à abertura do gap na região $\vec{k}=0$.

Os gráficos da Figura 5.5, que ilustram uma tira de largura $w = 1000\text{nm}$, apresentam resultados similares. Na tira mais larga, os estados de dispersão linear são melhor localizados nas bordas se comparados ao caso $w = 200\text{nm}$. Em $\vec{k}=0$, temos um estado quatro vezes degenerado, em que as quatro funções de onda se sobrepõem. Para $\vec{k}=\pm 0.01\text{nm}$, a helicidade dos portadores de carga é revelada: elétrons de spin up e down se acumulam em bordas distintas do sistema de acordo com sua direção de propagação. Numa mesma borda, estados de spins diferentes coexistem e são contrapropagantes: enquanto um se move na direção positiva do eixo, o outro percorre o material no sentido negativo.

Figura 5.4: Em vermelho tracejado, portadores de carga com spin up. Em azul, spin down. (a) Espectro de uma tira de HgTe/CdTe com largura $w = 200 \text{ nm}$; (b) Funções de onda dos estados de borda para $\vec{k}=0$. Cada gráfico corresponde a uma diferente energia eletrônica, devido a um pequeno gap, da ordem de $\Delta E = 0.43 \text{ meV}$ entre os estados; (c) e (d) Funções de onda dos estados de borda para $\vec{k}=0.01 \text{ nm}^{-1}$. Elétrons se movendo no sentido positivo do eixo se localizam em determinada borda da amostra dependendo de seu spin, como exemplo ilustrado para $\vec{k}=0.01 \text{ nm}^{-1}$.

Figura 5.5: Espectro de uma tira de HgTe/CdTe com largura $w = 1000$ nm e funções de onda dos estados de borda para $\vec{k}=0$ e $\vec{k}=\pm 0.01$ nm⁻¹. Em vermelho tracejado, portadores de carga com spin up. Em azul, spin down. Os estados de dispersão linear são melhor localizados nas bordas com relação a tiras de largura menor. Em $\vec{k}=0$, temos quatro densidades de probabilidade que se sobrepõem, no estado quatro vezes degenerado com $E=7.46$ meV. Para $\vec{k}=\pm 0.01$ nm, é possível visualizar os estados helicais (spin-polarizados contrapropagantes).

5.2 Transporte eletrônico no regime Hall quântico de spin

A relação de dispersão a campo magnético nulo pode ser visualizada na Figura 5.6. Na região de energias entre -11.42meV e 13.19meV , há um gap nos estados do bulk, surgindo apenas estados de borda de dispersão aproximadamente linear em torno de $k = 0$. Aproximando o gráfico para os estados centrais, como na Figura 5.6(dir.), percebemos para a tira de largura $w = 200\text{nm}$ um pequeno gap entre as energias 7.27meV e 7.71meV nos estados de borda. Na ausência de campo magnético é observada a degenerescência de spin, isto é, os estados de spin up e spin down ficam sobrepostos no espectro.

Figura 5.6: Relação de dispersão de uma fita de TI com largura $w = 200\text{nm}$ na ausência de campo magnético. Linha cheia azul: estados de spin down; linha tracejada vermelha: estados de spin up. Note que para $B_0 = 0$ há degenerescência de spin. (esq.) Entre as energias -11.42meV e 13.19meV , é observado um gap nos estados do bulk, surgindo apenas estados de borda de dispersão aproximadamente linear na região central do espectro. (dir.) Estados de borda do material na vizinhança de $\vec{k} = 0$. Há um pequeno gap entre as energias 7.27meV e 7.71meV .

Utilizando o método das matrizes de Green recursivas, calculamos as correntes locais no material, sempre inserindo portadores de carga com $k_x > 0$. Os resultados estão ilustrados nos gráficos da Figura 5.7. Para a energia de Fermi $E_F = -10\text{meV}$, fica claro que os estados de dispersão linear, os únicos presentes nesta região, correspondem a estados de borda helicais.

Conforme esperado para uma tira homogênea, as transmissões através de quaisquer planos da tira são iguais entre si e equivalente à transmissão total entre os contatos. O efeito Hall quântico de spin é observado no sistema: a transmissão é quantizada por um valor correspondente ao número de canais disponíveis na relação de dispersão para determinado valor de energia.

A transmissão total através do plano vertical $x_c = 500\text{nm}$ nessas tiras é dada pelo gráfico da

Figura 5.7: Correntes locais em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões 200×1000 nm, para diversos valores da energia de Fermi E_F e $B_0 = 0$ T. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_g = 0$ em todos os pontos, de modo que as barras verticais são meramente ilustrativas (não há junções). Note o transporte pelos estados de borda para valores de E_F dentro do gap.

Figura 5.8, onde o espectro do material foi repetido para comparação. Note que os resultados de spin up (azul) e down (vermelho) estão sobrepostos no gráfico, em valores inteiros de corrente. Se somadas, as transmissões se dariam em inteiros pares, conforme esperado para o QSHE. O ponto de corrente nula na região de 7.5 meV ocorre por conta do pequeno gap observado entre os estados de borda.

Utilizando a tensão de gate V_G em uma porção do material, foram simuladas junções do tipo “ $n - n' - n$ ”, “ $n - TI - n$ ” e “ $n - p - n$ ”, como modelado na Seção 4.4. Nos resultados que seguem, a região (L) entre $x_0 = 0$ nm e $x_L = 333$ nm permaneceu inalterada, à porção central (C) foi aplicada tensão V_G e a região (R), entre $x_R = 666$ nm e $x = 1000$ nm, também permaneceu inalterada. As correntes locais foram calculadas para a Energia de Fermi 30 meV.

Na Figura 5.9 estão apresentados os resultados para a junção do tipo “ $n - n' - n$ ”, obtida com $V_G = 10$ meV. A região (L) possui padrão de interferência com máximos e mínimos de spin up e down: tal efeito é observado por conta dos portadores de carga que são refletidos na interface x_L . Em menor escala, o mesmo ocorre na região central, onde as partículas são refletidas pela

Figura 5.8: Correntes totais por spin através do plano $x = 500\text{nm}$ em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$, em função da energia de Fermi.

interface x_R . Na porção (R), as cargas são completamente drenadas pelo contato à direita, e apenas fluem na direção de $k_x > 0$.

Figura 5.9: Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$, e junção do tipo $n - n' - n$. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 10\text{meV}$ em todos os pontos entre $x_L = 333\text{nm}$ e $x_R = 666\text{nm}$.

Na Figura 5.10 estão apresentados os resultados para a junção do tipo “ $n - TI - n$ ”, obtida com $V_G = 30\text{meV}$. Da mesma forma que no caso “ $n - n' - n$ ”, a região à esquerda possui padrão de interferência com máximos e mínimos de spin up e down. A diferença ocorre na porção central do sistema: todos os portadores de carga do bulk são refletidos para (L), restando apenas estados de borda helicais. Ao entrarem na porção (R), as partículas difundem pelo material e

são completamente drenadas pelo contato em $x = 1000\text{nm}$.

Figura 5.10: (a) Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$, e junção do tipo $n-TI-n$. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 30\text{ meV}$ em todos os pontos entre $x_L = 333\text{ nm}$ e $x_R = 666\text{ nm}$. Note que os portadores de carga do bulk são completamente refletidos para a região esquerda em x_L . (b) Diagrama da região de interface e (c) ampliação das correntes locais na região da interface da junção. Os portadores de carga com spin down oscilam em regiões onde a propagação é na direção positiva ou negativa do eixo x , sempre na direção do estado de borda permitido na região dopada (neste caso, positiva no eixo y). As correntes de spin down descrevem um zig-zag até a borda $y = 200\text{ nm}$, onde podem se propagar livremente através do isolante topológico.

Na interface entre a região “n” e o isolante topológico, há um comportamento de zig-zag das correntes locais de spin down. Ao atingirem a porção central do material, não há estado permitido para que os portadores de carga se propaguem no bulk. Como consequência, eles são transmitidos na direção da borda $y = 200\text{ nm}$ e de volta para a região $x < 333\text{ nm}$, como ilustrado na Figura 5.10. Este processo se repete até que atinjam a borda superior, onde podem atravessar o material livremente até a região (R).

Figura 5.11: Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões 200×1000 nm, e junção do tipo $n-p-n$. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 60\text{meV}$ em todos os pontos entre $x_L = 333\text{nm}$ e $x_R = 666\text{nm}$.

Os resultados para a junção do tipo “ $n-p-n$ ”, obtida com $V_G = 60\text{meV}$, estão apresentados na Figura 5.11. Ambas as regiões (L) e (C) possuem padrão de interferência para os spins up e down, por conta das reflexões em x_L e x_R , respectivamente. Na região central, ainda é possível visualizar os estados de borda helicais, que coexistem com partículas do bulk. Na porção à direita, as cargas difundem e são completamente drenadas pelo contato.

A transmissão total através do plano vertical $x_c = 500\text{nm}$ (no centro da tira) em função da tensão V_G é dada pelo gráfico da Figura 5.12. Com a junção, permanece a degenerescência de spin, ficando suas correntes sobrepostas no gráfico. As transmissões não se dão mais em patamares bem definidos, por conta das reflexões dos portadores de carga nas interfaces.

Figura 5.12: Correntes totais por spin através do plano $x = 500$ nm em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões 200×1000 nm, em função da energia de Fermi.

6 *Tiras de HgTe/CdTe na presença de campo magnético*

Utilizando o termo Zeeman $\frac{\mu_B B_0}{2} \Gamma_g^z$ e a correção orbital $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}$, além dos fatores giromagnéticos $g_e = 22.7$ e $g_h = -1.21$, encontramos o espectro dos sistemas de interesse na presença de campo magnético.

A Figura 6.1 ilustra a relação de dispersão de tiras com largura $w = 100, 200, 500$ e 1000nm na presença do campo magnético $B_0 = 0.05\text{T}$ perpendicular à superfície do dispositivo. Nota-se que estados de borda são os mais afetados por B_0 e que as tiras mais largas são mais sensíveis ao campo: enquanto o sistema com $w = 100\text{nm}$ apresenta bulk quase idêntico ao da Figura 5.3 e estados de borda ligeiramente deslocados de sua posição inicial, indicando uma quebra da degenerescência de spin, a tira de largura $w = 1000\text{nm}$ tem seu espectro completamente alterado.

Com a aplicação de campos magnéticos positivos, os portadores de carga com spin up se deslocam para energia maiores e aqueles com spin down vão na direção contrária. Como indicado pelas linhas azuis na Figura 6.1, os estados de borda de spin down apresentam cruzamento em $\vec{k}=0$ e dispersão linear, se deformando na direção da banda de valência. Por sua vez, os estados de spin up apresentam anticruzamento e se deformam na direção da banda de condução.

Nas Figuras 6.2 e 6.3 são estudadas, respectivamente, as funções de onda dos estados de spin up e down, com campo magnético aplicado de 0.05T na tira de largura $w = 1000\text{nm}$. Há apenas uma banda de spin up visível na região do gap entre os estados do bulk, indicada em vermelho no primeiro gráfico da Figura 6.2, que apresenta um platô na região $-0.02\text{nm}^{-1} < |\vec{k}| < 0.02\text{nm}^{-1}$ e dispersão linear para $|\vec{k}| > 0.03\text{nm}^{-1}$. Nota-se que na região de platô os portadores de carga se acomodam no bulk. Os estados de spin down, indicados em azul no primeiro gráfico da Figura 6.3, apresentam dispersão aproximadamente linear em toda a região de gap entre as banda de valência e condução. Para ambos os spins, a dispersão linear mantém estados bem localizados

nas bordas do dispositivo, mesmo na presença de campo magnético.

Figura 6.1: Espectro de tiras de HgTe/CdTe para diversas larguras em campo magnético $B_0 = 0.05$ T. A degenerescência dos estados de borda, ao centro dos gráficos, é quebrada. À medida que a largura “ w ” da tira diminui, menor a contribuição do campo magnético para o espectro. Os demais sistemas indicam que $B_0 \neq 0$ mantém estados de Dirac com dispersão linear para um dos spins.

Figura 6.2: Dispersão e funções de onda dos portadores de carga de spin up em tiras de HgTe/CdTe com largura $w = 1000 \text{ nm}$ na presença de campo magnético $B_0 = 0.05 \text{ T}$. Foram analisadas as densidades de probabilidade dos elétrons em uma mesma banda de energia, nos valores $\vec{k} = 0.00, 0.03$ e 0.05 nm^{-1} . Nota-se que nas regiões em que a dispersão se mantém linear, indicados pelo triângulo e pela cruz, os estados continuam bem localizados nas bordas do material. Na região de platô, representada pelo círculo, o estado é identificado como parte do bulk.

Figura 6.3: Dispersão e funções de onda dos portadores de carga de spin down em tiras de HgTe/CdTe com largura $w = 1000 \text{ nm}$ na presença de campo magnético $B_0 = 0.05 \text{ T}$. Foram analisadas as densidades de probabilidade dos elétrons de spin down com dispersão linear, nos valores $\vec{k} = 0.00$ e 0.05 nm^{-1} . Nota-se que no ponto de cruzamento em $\vec{k} = 0.00$, indicado pelo círculo, os estados são degenerados e continuam bem localizados nas bordas do material. O mesmo ocorre para o estado representado pelo triângulo, com $\vec{k} = 0.05 \text{ nm}^{-1}$.

6.1 Transporte eletrônico na presença de campo magnético

A relação de dispersão do sistema a campo magnético 0.5T pode ser visualizada na Figura 6.4. Há um gap entre os estados de energia com spin down entre 9.98 e 17.34meV, onde apenas portadores de carga com spin up são permitidos.

Figura 6.4: Relação de dispersão de uma fita de TI com largura $w = 200\text{nm}$ para $B_0 = 0.5\text{T}$. Linha cheia azul: estados de spin down; linha tracejada vermelha: estados de spin up. É possível visualizar um gap para portadores de carga com spin down entre as energias 9.98meV e 17.34meV, enquanto há presença de spin up em todo o espectro.

Utilizando o método das matrizes de Green recursivas, calculamos as correntes locais no material, sempre inserindo portadores de carga com $k_x > 0$.

Calculamos as correntes locais no material para portadores de carga inseridos pelos contatos com $k_x > 0$ pelo método das matrizes de Green recursivas. Os resultados estão ilustrados nos gráficos da Figura 6.5. Para a energia de Fermi $E_F = 15\text{meV}$, fica claro que o estado de spin up, único presente nesta região do espectro, corresponde a um estado de borda quirial. Na energia $E_F = 5\text{meV}$, surge um estado de spin down nas correntes locais, também localizado na região das bordas. Para $E_F > 17.34\text{meV}$ ou $E_F < -8.41\text{meV}$, entramos nas regiões do bulk.

Conforme esperado para uma tira homogênea, as transmissões através de quaisquer planos da tira são iguais entre si e equivalente à transmissão total entre os contatos. A corrente ainda flui pelos estados de borda do sistema: a transmissão é quantizada por um valor correspondente ao número de canais disponíveis na relação de dispersão para determinado valor de energia.

Figura 6.5: Correntes locais em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões 200×1000 nm, para diversos valores da energia de Fermi E_F e $B_0 = 0.5$ T. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_g = 0$ em todos os pontos, de modo que as barras verticais são meramente ilustrativas (não há junções). Note o transporte pelos estados de borda para valores de E_F dentro do gap e o estado de borda quiral para $E_F = 15$ meV.

Figura 6.6: Correntes totais por spin através do plano $x_c = 500$ nm em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões 200×1000 nm, em função da energia de Fermi. A degenerescência de spin é quebrada com a aplicação de campo magnético. As transmissões são dadas em patamares inteiros, equivalentes ao número de canais presentes no espectro, conforme esperado para o efeito Hall quântico.

A transmissão total através do plano vertical $x_c = 500\text{nm}$ nessas tiras é dada pelo gráfico da Figura 6.6, onde o espectro do material foi repetido para comparação. Note que os resultados de spin up (azul) e down (vermelho) não se sobrepõem no gráfico. Com a aplicação de campo magnético, a degenerescência de spin é quebrada: há corrente total líquida de carga em patamares inteiros ímpares, conforme esperado para o QHE.

Utilizando a tensão de gate V_G em uma porção do material, foram simuladas junções do tipo “ $n - X - n$ ” no sistema. Nos resultados que seguem, a região (L) entre $x_0 = 0\text{nm}$ e $x_L = 333\text{nm}$ permaneceu inalterada, à porção central (C) foi aplicada tensão V_G e a região (R), entre $x_R = 666\text{nm}$ e $x = 1000\text{nm}$, também permaneceu inalterada. As correntes locais foram calculadas para a Energia de Fermi 30meV .

Na Figura 6.11 estão apresentados lado a lado alguns resultados obtidos para diversos valores de V_G . Em geral, a região (L) possui padrão de interferência com máximos e mínimos de spin up e down: tal efeito é observado por conta dos portadores de carga que são refletidos na interface x_L . Quando chegam à porção (R), as cargas difundem e fluem na direção de $k_x > 0$, sendo completamente drenadas pelo contato à direita. À exceção da quebra de degenerescência entre os estados de spin up e down, não há diferença qualitativa dos dispositivos $n - n' - n$ e $n - p - n$ entre os casos de presença ou ausência do campo magnético.

Figura 6.7: Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$, e junção do tipo $n - TI \uparrow - n$, na presença de campo magnético $B_0 = 0.5\text{T}$. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 20\text{meV}$ em todos os pontos entre $x_L = 333\text{nm}$ e $x_R = 666\text{nm}$. Note que a energia de Fermi está posicionada sobre o gap entre os estados de spin down e não há transmissão deste tipo de portador de carga na região central.

A diferença observada se dá para as junções do tipo “ $n-TI-n$ ”. A Figura 6.7 ilustra as correntes locais de uma tira de HgTe/CdTe com largura $w = 200\text{nm}$ na presença de campo magnético $B_0=0.5\text{T}$, obtida com $V_G = 20\text{meV}$. A energia de Fermi cruza a região de gap entre os estados de spin down, e é observada apenas corrente de portadores de carga com spin up atravessando o dispositivo.

Aumentando o potencial de gate, de forma a deslocar o espectro para que a energia de Fermi atinja estados permitidos de portadores de carga com spin down, voltamos a ver corrente desse tipo nas bordas do material, como ilustrado na Figura 6.8 para $V_G=22.5\text{meV}$. Parte da corrente de spin down é difundida pela região (R) até ser absorvida pelo contato, outra parte reflete na interface $x_R = 666\text{nm}$ e volta à região (L) pela borda oposta.

Figura 6.8: Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões $200 \times 1000 \text{ nm}$, e junção do tipo $n-TI-n$, na presença de campo magnético $B_0=0.5\text{T}$. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 22.5\text{meV}$ em todos os pontos entre $x_L = 333\text{nm}$ e $x_R = 666\text{nm}$. É observada transmissão de portadores de carga spin-polarizados nas bordas do material.

À medida que aumentamos a tensão de gate, surge um efeito interessante: apesar de haver estados com portadores de carga de spin down permitidos na região central, a corrente eletrônica desse tipo se anula para alguns valores de V_G . Este comportamento pode ser visto na Figura 6.9, para $V_G=25\text{meV}$. As funções de onda dos estados cruzados pela energia E_F nos casos $V_G=22.5$ e $V_G=25$, traçadas nos gráficos da Figura 6.10, mostram que o espectro do material não prevê diferença qualitativa entre os dois. Além disso, este tipo de comportamento não ocorre na tira homogênea, sem junções ($V_G=0$), como mostrado na Figura 6.5. Tal resultado indica que este

comportamento é decorrente da geometria da junção.

Figura 6.9: Correntes locais em uma tira de HgTe/CdTe com dimensões 200×1000 nm, e junção do tipo $n-TI-n$, na presença de campo magnético $B_0=0.5$ T. A tensão de gate foi uniformemente mantida a $V_G = 25$ meV em todos os pontos entre $x_L = 333$ nm e $x_R = 666$ nm. Embora exista estado de borda permitido para portadores de carga com spin down na região central do dispositivo, a corrente se anula em relação ao caso $V_G = 22.5$ meV.

Figura 6.10: Estados de spin down cortados pela energia de Fermi E_F nas junções com potencial de gate $V_G=22.5\text{meV}$ (esq.) e $V_G=25\text{meV}$ (dir.). Ambos indicam a presença de portadores de carga na borda superior da tira de HgTe/CdTe.

Figura 6.11: Correntes locais em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões 200×1000 nm, para diversas tensões de gate, campo magnético 0.5T e energia de Fermi 30.0meV. Os resultados das tiras $V_G=20$ meV, $V_G=22.5$ meV e $V_G=25$ meV foram repetidos lado a lado para facilitar a comparação.

A fim de estudar o comportamento da transmissão total através do material, calculamos a corrente líquida em $x_c = 500$ nm (no centro da tira) em função da tensão V_G . Os resultados obtidos são dados pelo gráfico da Figura 6.12. Conforme esperado, as transmissões não se dão mais em patamares bem definidos, por conta das reflexões dos portadores de carga nas interfaces da junção.

O efeito observado nas figuras 6.8 e 6.9 se repete por toda a região de energias entre $V_G = 20.0$ meV e $V_G = 35.0$ meV. Nestes casos, a porção central da junção apresenta dois estados de borda possíveis para os portadores de carga, um de spin up e outro de spin down. Não há razão inferida do espectro para o desaparecimento de um dos estados na condutância. Entretanto, uma oscilação é observada na corrente de spin down - Figura 6.12(dir.) - indicando uma alternância entre a transmissão e a reflexão total daquele estado. Acreditamos que se trata de um efeito de ressonância do tipo “Fabry-Perot”: funções de onda são refletidas na interface e interferem

de forma construtiva/destrutiva, dependendo das dimensões da região central e do potencial de gate.

Figura 6.12: Correntes totais por spin através do plano $x = 500\text{nm}$ em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$, campo magnético 0.5 T e energia de Fermi 30.0 meV , em função da tensão de gate.

6.2 Junções n-X-n: regimes de transporte

As correntes totais através dos dispositivos foram calculadas em função da tensão de gate aplicada, na presença de diferentes valores de campo magnético. Os resultados estão apresentados nos gráficos da Figura 6.13, para os campos $B_0=0.0, 0.1, 0.5$ e 2.0 T . Um comportamento similar para cada um dos diferentes regimes “ $n-X-n$ ” é observado no sistema.

As regiões “ $n-n'-n$ ” se dão em patamares de condutância, com degenerescência quebrada para campos magnéticos finitos. Junções do tipo “ $n-p-n$ ”, por sua vez, se assimilam a um sinal de ruído, embora algumas tendências sejam observadas - como o aumento da corrente com V_G nos campos $B_0=0$ e 0.1 T , por exemplo.

A porção central dos gráficos, do tipo “ $n-TI-n$ ”, apresenta alguns comportamentos inesperados. Se o gap entre energias é pequeno o suficiente, são observadas correntes em regiões onde não há estado previsto - como nos casos $B_0=0.0$ e $B_0=0.1\text{ T}$, que apresentam apenas vales na condutância em torno de $V_G=20\text{ meV}$, e não a ausência de corrente, embora não haja estados de spin down no espectro do material nessa faixa de energia. Quando o gap é grande o suficiente para interromper a transmissão de portadores de carga, como nos casos $B_0=0.5$ e $B_0=2.0\text{ T}$,

outro efeito surge: mesmo em energias onde era prevista a presença de estados, a condutância se anula periodicamente.

Tais resultados indicam a possibilidade de utilizar dispositivos “ $n - X - n$ ” em circuitos baseados em spintrônica. Variando-se V_G e o campo magnético B_0 , selecionamos os portadores de carga spin-polarizados que podem ser transmitidos pelo material, com proteção topológica e baixa decoerência.

Figura 6.13: Correntes totais por spin através do plano $x = 500\text{nm}$ em uma tira homogênea de HgTe/CdTe de dimensões $200 \times 1000\text{ nm}$ com energia de Fermi 30.0meV e campo magnético $B_0 = 0.0, 0.1, 0.5$ e 2.0T , em função da tensão de gate.

7 Conclusão

Isolantes topológicos (TI) são materiais que se comportam como isolantes no bulk mas possuem estados de borda metálicos. Em sistemas bidimensionais, TI's apresentam o efeito Hall quântico de spin: portadores de carga de spin opostos viajam em direções contrárias nas bordas, propriedade denominada “helicidade”. Não há corrente no interior do material, e a condutância é quantizada. Para além de sua importância na construção de uma teoria topológica de bandas, seu estudo tem se mostrado rico pela possibilidade de aplicações tecnológicas desses materiais, como a spintrônica e a computação quântica.

O hamiltoniano BHZ é um hamiltoniano efetivo de quatro bandas, proposto por Bernevig, Hughes e Zhang [11] para descrever TI's como o poço quântico de HgTe/CdTe. Ele pode ser obtido através de argumentos de simetria ou pelo método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, supondo sistemas que apresentem simetria de reversão temporal. Variando os parâmetros do hamiltoniano, dependentes da espessura de HgTe entre o material de barreira (CdTe), é possível obter os regimes de isolante trivial e isolante topológico. Neste trabalho, utilizamos os métodos de diferenças finitas e funções de Green para estudar propriedades do transporte eletrônico em isolantes topológicos bidimensionais e dispositivos construídos com base em poços quânticos de HgTe/CdTe. Em especial, calculamos correntes locais em tiras do material quando o conjunto é ligado a dois contatos.

Para diversas configurações do sistema, a estrutura de bandas nas vizinhanças do ponto Γ foi obtida numericamente pela diagonalização do hamiltoniano BHZ, discretizado no espaço das coordenadas pelo método das diferenças finitas. Em sistemas no regime topológico, verificamos a existência de estados de borda helicais na ausência de campo magnético. Nossos resultados foram comparados com as soluções analíticas de casos-limite do sistema e também com resultados apresentados na literatura, como o de Scharf e colaboradores [21]. A principal vantagem da técnica que desenvolvemos é a liberdade para inserir perturbações e correções no conjunto, o que nos permite estudar dispositivos cada vez mais complexos.

Utilizamos o formalismo das funções de Green para o cálculo das propriedades de transporte. Para a solução numérica na rede discretizada, implementamos o método das matrizes de Green recursivas [23] ao modelo BHZ. Dessa forma, calculamos as correntes locais no material. A transmissão de elétrons foi obtida sítio a sítio para tiras de HgTe/CdTe. De fato, quando a tira é ligada dois contatos injetando carga no sistema, os portadores atravessam o material pelas bordas, respeitando a polarização de spin imposta pelo regime topológico. Foi verificada a helicidade desses estados, e obtivemos condutância quantizada para a transmissão de elétrons através do material, caracterizando o efeito Hall quântico de spin. Na ausência de campo magnético, os patamares se dão em múltiplos pares de e^2/h . Com aplicação de campo, a degenerescência é quebrada e patamares para qualquer inteiro múltiplo de e^2/h são observados na condutância, como observado no efeito Hall quântico usual.

Motivados pelos recentes resultados experimentais de Gusev et al [4], simulamos junções do tipo “ $n - X - n$ ” com poços de HgTe/CdTe, com auxílio de uma tensão de gate V_G adicionada sítio a sítio nos cálculos. Aqui, X representa a região intermediária onde a tensão de gate pode ajustar o nível de Fermi para coincidir com a banda de condução (portadores tipo “ n ”), de valência (portadores tipo “ p ”) ou com o gap onde estão os estados de borda (tipo “ TI ”). Nossos resultados mostram que sistemas desse tipo, na presença de campo magnético, podem atuar como filtros selecionando elétrons polarizados permitidos para atravessá-lo. Junções do tipo “ $n - n' - n$ ” apresentam patamares na condutância, embora menos definidos que nas tiras simples do material. Sistemas “ $n - p - n$ ”, por sua vez, resultam em sinal de corrente semelhante a um ruído, embora tendência de crescimento da corrente eletrônica com o aumento de V_G seja verificada na região estudada. Os principais resultados se deram nas junções “ $n - TI - n$ ”: com a variação da tensão de gate, é observada uma oscilação na corrente através do dispositivo. Dessa forma, é possível controlar a passagem de portadores de carga spin-polarizados apenas com o ajuste fino do potencial V_G .

As técnicas desenvolvidas neste trabalho possibilitam o estudo dos isolantes topológicos 2D considerando interações e geometrias cada vez mais complexas. Tal pesquisa é de fundamental importância para o desenvolvimento de modelos realistas de dispositivos baseados nesses novos materiais. A continuidade do projeto envolve analisar efeitos de desordem e supercondutividade induzida nas bordas desses sistemas.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Y. Kitaev, *Fault-tolerant quantum computation by anyons*, arXiv:quant-ph/9707021v1 (1997).
- [2] Vlad S. Pribiag, Arjan J. A. Beukman, Fanming Qu, Maja C. Cassidy, Christophe Charpentier, Werner Wegscheider and Leo P. Kouwenhoven, *Edge-mode superconductivity in a two-dimensional topological insulator*, Nature Nano. Lett. **86** (2015), DOI:10.1038.
- [3] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*, Phys. Rev. Lett. **45** (1980), 494–497.
- [4] G. M. Gusev, A. D. Levin, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, *Quantum Hall Effect in n-p-n and n-2D Topological Insulator-n Junctions*, Phys. Rev. Lett. **110** (2013), 076805.
- [5] M. I. Dyakonov and V. I Perel, *Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors*, Physics Letters **35** (1971).
- [6] R. B. Laughlin, *Quantized Hall conductivity in two dimensions*, Phys. Rev. B **23** (1981), 5632.
- [7] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Quantized Hall conductance*, Phys. Rev. B **25** (1982), 2185.
- [8] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, Phys. Rev. Lett. **49** (1982), 405–408.
- [9] F. D. M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 2015–2018.
- [10] C. L. Kane and E. J. Mele, *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*, Phys. Rev. Lett. **95** (2005), 226801.
- [11] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, Science **314** (2006), no. 5806, 1757–1761.
- [12] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brune, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, Science **318** (2007), no. 5851, 766–770.

- [13] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Física do Estado Sólido*, Cengage Learning (2011).
- [14] T. Ando, *Theory of Quantum Transport in a Two-Dimensional Electron System under Magnetic Fields*, J. Phys. Soc. Jpn. **37** (1974), 622.
- [15] J. J. Sakurai and Jim Napolitano, *Mecânica Quântica Moderna*, Segunda edição, Bookman (2013).
- [16] B. Andrei Bernevig and Taylor Hughes, *Topological insulators and topological superconductors*, Princeton University Press (2013).
- [17] Liu, C. X., Hughes, T. L., Qi, X. L., Wang, K. and Zhang, S. C., *Quantum spin Hall effect in inverted type-II semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **100** (2008), 236601.
- [18] Du, L., Knez, I., Sullivan, G. and Du, R-R., *Robust helical edge transport in gated InAs/GaSb bilayers*, Phys. Rev. Lett. **114** (2015), 096802.
- [19] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Colloquium : Topological insulators*, Rev. Mod. Phys. **82** (2010), 3045–3067.
- [20] N. A. Cade and P. M. Lee, *Self consistent energy band structures for HgTe and CdTe*, Solid State Commun. **56** (1985), 637-641.
- [21] Benedikt Scharf, Alex Matos-Abiague, and Jaroslav Fabian, *Magnetic properties of HgTe quantum wells*, Phys. Rev. B **86** (2012), 075418.
- [22] Bin Zhou, Hai-Zhou Lu, Rui-Lin Chu, Shun-Qing Shen, and Qian Niu, *Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System*, Phys. Rev. Lett. **101** (2008), 246807.
- [23] E. R. Mucciolo and C. H. Lewenkopf, *The recursive Green's function method for graphene*, J. Comp. Electronics (2013), to appear.
- [24] Lopez Sancho, M. P., Lopez Sancho, J. M. and Rubio, J. *Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions*, J. Phys. F: Met. Phys. **15** (1985).
- [25] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, *Topological insulators and superconductors*, Rev. Mod. Phys. **83** (2011), 1057–1110.
- [26] Conan Weeks, Jun Hu, Jason Alicea, Marcel Franz, and Ruqian Wu, *Engineering a Robust Quantum Spin Hall State in Graphene via Adatom Deposition*, Phys. Rev. X **1** (2011), 021001.
- [27] G. M. Gusev, Z. D. Kvon, O. A. Shegai, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and J. C. Portal, *Transport in disordered two-dimensional topological insulators*, Phys. Rev. B **84** (2011), 121302.
- [28] P Michetti, P H Penteado, J C Egues, and P Recher, *Helical edge states in multiple topological mass domains*, Semicond. Sci. and Technol. **27** (2012), no. 12, 124007.

- [29] Hjalmar Eriksson, *From the quantum Hall effect to topological insulators*, Uppsala Universitet (2010).
- [30] G. D. Mahan, *Condensed Matter in a Nutshell*, Princeton University Press (2011).
- [31] Denis Ricardo Candido, *Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda*, Tese de Mestrado, Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos (2013).
- [32] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).
- [33] Alexander L. Fetter and John Dirk Walecka *Quantum theory of many-particle systems*, Dover Publications (2003).

APÊNDICE A – Transformações adiabáticas do Hamiltoniano

Mudanças adiabáticas são aquelas que ocorrem a partir de transformações lentas de um sistema. A cada intervalo de tempo “dt” o conjunto está localmente em equilíbrio, permanecendo em um estado instantâneo do Hamiltoniano, de forma que o tempo pode ser tratado como um parâmetro:

$$H(t) |n; t\rangle = E_n(t) |n; t\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Escrevemos a evolução temporal de um sistema quântico como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha; t\rangle = H(t) |\alpha; t\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Para sistemas adiabáticos, deve valer (A.1). Supondo uma solução para o modelo em termos das funções de base $|n; t\rangle$, temos

$$|\alpha; t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt', \quad (\text{A.4})$$

onde um fator de fase θ_n foi separado dos coeficientes $c_n(t)$ e escrito explicitamente, pela integral no tempo da autoenergia.

Substituindo (A.11) em (A.2), temos:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle &= H(t) \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} [c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle] &= \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} H(t) |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow i\hbar \sum_n \left[e^{i\theta_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} (c_n(t) |n; t\rangle) + i c_n(t) |n; t\rangle e^{i\theta_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} \theta_n(t) \right] &= \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} E_n(t) |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow i\hbar \sum_n \left[e^{i\theta_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} (c_n(t) |n; t\rangle) - \frac{i}{\hbar} c_n(t) |n; t\rangle e^{i\theta_n(t)} E_n(t) \right] &= \sum_n \cancel{c_n(t) e^{i\theta_n(t)} E_n(t) |n; t\rangle}, \\
 \Rightarrow i\hbar \sum_n e^{i\theta_n(t)} \left(\dot{c}_n(t) |n; t\rangle + c_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right) &= 0, \\
 \Rightarrow \langle m; t | \sum_n e^{i\theta_n(t)} \dot{c}_n(t) |n; t\rangle &= - \langle m; t | \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \sum_n e^{i\theta_n(t)} \dot{c}_n(t) \langle m; t | n; t\rangle &= - \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \sum_n e^{i\theta_n(t)} \dot{c}_n(t) \delta_{mn} &= - \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \dot{c}_m(t) &= - \sum_n c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle. \tag{A.5}
 \end{aligned}$$

Note que no caso de Hamiltoniano independente do tempo, os autoestados também o serão, resultando em $\dot{c}_m(t)=0$. Retornaríamos, assim, à solução conhecida $|\alpha; t\rangle = \sum c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle$.

Tomando a derivada no tempo em ambos os lados da equação (A.1), podemos obter uma expressão alternativa para $\langle m; t | \partial_t |n; t\rangle$, com $m \neq n$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} [H(t) |n; t\rangle] &= \frac{\partial}{\partial t} [E_n(t) |n; t\rangle], \\
 \Rightarrow \dot{H}(t) |n; t\rangle + H(t) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle &= \dot{E}_n(t) |n; t\rangle + E_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \langle m; t | \dot{H}(t) |n; t\rangle + \langle m; t | H(t) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle &= \dot{E}_n(t) \langle m; t | n; t\rangle + E_n(t) \langle m; t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \langle m; t | \dot{H}(t) |n; t\rangle + E_m(t) \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle &= +E_n(t) \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle, \\
 \Rightarrow \langle m; t | \partial_t |n; t\rangle &= - \frac{\langle m; t | \dot{H}(t) |n; t\rangle}{E_m(t) - E_n(t)}. \tag{A.6}
 \end{aligned}$$

Utilizando (A.5) e (A.6), reescrevemos as derivadas dos coeficientes como

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m; t | \partial_t |m; t\rangle + \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle m; t | \dot{H}(t) |n; t\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]}. \tag{A.7}$$

O primeiro termo desta equação é relacionado à frequência natural do estado. À medida que o tempo passa, o termo do somatório implica que o estado “m” se mistura aos demais, devido à dependência temporal do Hamiltoniano.

Um sistema pode ser considerado adiabático se a escala de tempo de oscilação natural for muito menor que a escala τ de variação do Hamiltoniano. Isto é, se

$$\langle m; t | \partial_t | m; t \rangle \sim \frac{E_m}{\hbar} \gg \frac{\langle m; t | \dot{H}(t) | n; t \rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \sim \frac{1}{\tau}. \quad (\text{A.8})$$

Realizamos, então, a **aproximação adiabática**, desprezando o segundo termo de (A.7):

$$\begin{aligned} \dot{c}_m(t) &= -c_m(t) \langle m; t | \partial_t | m; t \rangle, \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} c_m(t) &= -c_m(t) \langle m; t | \partial_t | m; t \rangle, \\ \Rightarrow \frac{dc_m}{c_m} &= -\langle m; t | \partial_t | m; t \rangle dt, \\ \Rightarrow \int_0^t \frac{dc_m}{c_m} &= -\int_0^t \langle m; t | \partial_t | m; t \rangle dt, \\ \Rightarrow \ln c_m(t) - \ln c_m(0) &= i\gamma_m(t), \end{aligned}$$

$$c_m(t) = c_m(0) e^{i\gamma_m(t)}, \quad (\text{A.9})$$

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle m; t | \partial_t | m; t \rangle dt. \quad (\text{A.10})$$

O sistema pode ser descrito, retomando a Eq. (A.11), como

$$|\alpha; t\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Numa perturbação adiabática não há mistura entre estados se o sistema é inicialmente puro. Uma partícula no estado “n” em $t=0$, permanecerá em “n” para qualquer tempo finito.

A novidade trazida pela aproximação adiabática reside no surgimento do termo (A.10), conhecido como **fase de Berry**. Este é um dos conceitos mais importantes na compreensão da teoria de bandas topológica: trata-se de uma manifestação física mensurável dos sistemas quânticos estudados, diretamente relacionada a sua formulação matemática.

Suporemos a partir daqui que as modificações adiabáticas do nosso sistema podem ser descritas por um vetor de parâmetros $\vec{R}=(R_1, R_2, R_3\dots)$, onde cada $R_i=R_i(t)$ é uma grandeza física

como campo magnético, campo elétrico, tensão, etc. Podemos reescrever a fase (A.10) como

$$\begin{aligned}\gamma_n(t) &= i \int_0^t \langle n; t | \nabla_{\vec{R}} | n; t \rangle \cdot \frac{d\vec{R}}{dt} dt, \\ &= i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} \langle n; \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n; \vec{R} \rangle \cdot d\vec{R}.\end{aligned}\tag{A.12}$$

Integrando a expressão em um ciclo pelo Teorema de Stokes e com o auxílio de uma notação perspicaz,

$$\begin{aligned}\gamma_n(t) &= i \oint_C \vec{A}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{R}, \\ &= \int [\nabla_{\vec{R}} \times \vec{A}_n(\vec{R})] \cdot d\vec{S},\end{aligned}\tag{A.13}$$

$$\vec{A}_n(\vec{R}) \equiv i \langle n; \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n; \vec{R} \rangle \cdot d\vec{R},\tag{A.14}$$

vemos que a fase de Berry é, na realidade, o fluxo de um campo $\mathcal{F}_n = \nabla_{\vec{R}} \times \vec{A}_n$ através da superfície delimitada pelo circuito de integração. Escrito ainda de outra forma, o campo $\mathcal{F}_n$ fica

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_n &= i \nabla_{\vec{R}} (\langle n; \vec{R} | \nabla_{\vec{R}} | n; \vec{R} \rangle), \\ \implies \mathcal{F}_n &= i \epsilon_{ijk} \nabla_j (\langle n; \vec{R} | \nabla_k | n; \vec{R} \rangle), \\ \implies \mathcal{F}_n &= i \langle \nabla n(\vec{R}) | \times | \nabla n(\vec{R}) \rangle, \\ \mathcal{F}_n &= i \langle \nabla_j n(\vec{R}) | \nabla_k n(\vec{R}) \rangle - i \langle \nabla_k n(\vec{R}) | \nabla_j n(\vec{R}) \rangle.\end{aligned}\tag{A.15}$$

Inserindo um conjunto completo de estados e utilizando (A.6), chegamos finalmente a

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_n &= i \sum_{n \neq m} \langle \nabla n(\vec{R}) | m(\vec{R}) \rangle \times \langle m(\vec{R}) | \nabla n(\vec{R}) \rangle, \\ &= i \sum_{n \neq m} \frac{\langle \nabla n(\vec{R}) | [\nabla_{\vec{R}} H] | m(\vec{R}) \rangle \times \langle \nabla m(\vec{R}) | [\nabla_{\vec{R}} H] | n(\vec{R}) \rangle}{(E_n - E_m)^2}.\end{aligned}\tag{A.16}$$

Das expressões (A.15) e (A.16), duas considerações podem ser feitas. A primeira delas nos mostra uma forma de medir a curvatura do **potencial de Berry** $\vec{A}_n$. A segunda revela os pólos existentes que contribuem para a integral (A.13): sempre que $E_n = E_m$ estiver dentro da área delimitada pelo caminho de integração, a fase de Berry não se anulará.

APÊNDICE B – Invariantes topológicos

Isolantes usuais, com energia de Fermi no gap entre as bandas de valência e condução, são topologicamente equivalentes aos semicondutores. Isto é, realizando transformações suaves no Hamiltoniano é possível deformar um semicondutor em um isolante e vice-versa. Estes materiais são também equivalentes ao estado de vácuo: a equação de Dirac prevê neste caso um gap entre as energias dos elétrons e de suas antipartículas - os pósitrons - que seriam os análogos dos estados de condução e valência, respectivamente.

O estado Hall quântico, discutido na Seção 2.2.1, foi o primeiro exemplo descoberto de isolante não trivial. Apesar de existir um gap entre seu estado preenchido de maior energia e o seguinte, como ilustrado na Figura B.2, ainda há condução pelas bordas, segundo a relação

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}. \quad (\text{B.1})$$

Não é possível transformar adiabaticamente o estado Hall quântico em um isolante comum, tampouco verificou-se a existência de um parâmetro de ordem local. O inteiro ν , conhecido como invariante TKNN, é o valor que caracteriza o sistema: trata-se do primeiro invariante topológico estudado na teoria de bandas dos materiais.

Número de Chern e o invariante TKNN

O número de Chern é obtido pela integral da curvatura do potencial (A.14) sobre a zona de Brillouin do material:

$$n_m = \int_{ZB} \mathcal{F}_m d^2\vec{k}. \quad (\text{B.2})$$

Ele caracteriza a topologia do potencial de Berry em termos do número de “buracos” presentes em sua configuração. Um sistema com número de Chern $n_m=0$ equivale ao vácuo, e seu potencial pode ser representado topologicamente por uma esfera. Para $n_m=1$, temos um material

Figura B.1: (esq.) Estados de borda quirais em um material no estado Hall quântico. O sistema é isolante no bulk, mas não pode ser transformado adiabaticamente em um isolante usual; (dir.) Níveis de energia de Landau para elétrons na presença de campo magnético. Há regiões preenchidas de estados ocupados e outras, acima do nível de Fermi, desocupadas, equivalente à estrutura de bandas de um isolante.

topológico com potencial homeomorfo a um toro, e assim sucessivamente. n_m pode ser visto como uma simetria associada à conservação de uma “carga topológica”.

Figura B.2: Representação de diferentes fatores topológicos, em analogia ao número de Chern. A ausência de buracos, $n=0$, corresponde a uma esfera ou um vaso. Para $n=1$, temos uma xícara com asa furada, homeomorfa a um toro. Um óculos é exemplo de objeto com topologia $n=2$. Créditos: Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences. Fonte: nobelprize.org

Partindo da fórmula de Kubo (D.10) para a condutividade, Thouless, Kohmoto, Nightingale e Nijss demonstraram que o invariante ν é equivalente ao número de Chern do potencial de Berry:

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{h} \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \sum_{a=1}^m -i(\langle \partial_i(a, \vec{k}) | \partial_j | a, \vec{k} \rangle - \langle \partial_j(a, \vec{k}) | \partial_i | a, \vec{k} \rangle). \quad (\text{B.3})$$

De fato, comparando esta expressão com a definição do número de Chern e a forma do campo $\mathcal{F}_m = \nabla \times \vec{A}_m$, verifica-se que ν e n_m são idênticos. Este resultado explica a robustez da quantização da condutância no estado Hall: ainda que haja deformações adiabáticas no Hamiltoniano ν permanece invariante, uma vez que descreve a topologia do sistema.

Invariante Z_2

Partindo da relação (B.3), podemos calcular a condutância Hall para sistemas com simetria de reversão temporal. Computaremos para o caso de partícula sem spin, que pode ser generalizado para elétrons facilmente [16]. Temos o campo de Chern

$$\mathcal{F}_{ij}(-\vec{k}) = -i(\langle \partial_i u(-\vec{k}) | \partial_j u(-\vec{k}) \rangle - i \leftrightarrow j). \quad (\text{B.4})$$

O estado $u(-\vec{k})$ pode ser escrito como $\Theta u(\vec{k}) = u^*(\vec{k})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{ij}(-\vec{k}) &= -i \sum_m [\partial_i u_m(-\vec{k})]^* \partial_j u_m(-\vec{k}) - i \leftrightarrow j, \\ &= -i \sum_m \partial_i u_m^*(-\vec{k}) \partial_j u_m(-\vec{k}) - i \leftrightarrow j, \\ &= -i \sum_m \partial_i u_m(\vec{k}) \partial_j u_m^*(\vec{k}) - i \leftrightarrow j, \\ &= -\mathcal{F}_{ij}(\vec{k}). \end{aligned}$$

Integrando sobre toda a ZB no espaço $\vec{k}$:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{F}_{ij}(-\vec{k}) \cdot d\vec{k} &= \int \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}) \cdot d\vec{k} \stackrel{!}{=} - \int \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}) \cdot d\vec{k}, \\ \implies \int \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}) \cdot d\vec{k} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Como resultado, a condutância Hall sempre se anula para sistemas com simetria de reversão temporal! Isolantes topológicos não são descritos, portanto, pelo invariante TKNN. Baseado nos conceitos de polarização de carga e polarização de reversão temporal, definimos o **invariante Z_2** :

$$(-1)^\nu = \prod_{\alpha=1}^4 \frac{\sqrt{\det[w(\Lambda_i)]}}{Pf[w(\Lambda_i)]}, \quad (\text{B.6})$$

onde $w_{ij}(\vec{k}) = \langle u_j(-\vec{k}) | \Theta | u_i(\vec{k}) \rangle$ é o operador de reversão temporal escrito em termos da base dos estados de Bloch. Os valores Λ_i são os pontos de momento invariantes por reversão temporal

na ZB.

Resultados com $\nu = 0$ equivalem ao vácuo (isolantes triviais), enquanto $\nu = 1$ descrevem isolantes topológicos. Materiais desse tipo possuem estados de borda helicais protegidos pela topologia: mesmo sob transformações adiabáticas do Hamiltoniano, ν não se altera, garantindo a existência dos pares de Kramers degenerados.

APÊNDICE C – Da equação de Dirac à estrutura de bandas do HgTe e CdTe

A equação de Dirac para partícula livre é dada por:

$$i\hbar\partial_t |\Psi(\vec{r}, t)\rangle = [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2] |\Psi(\vec{r}, t)\rangle \quad (\text{C.1})$$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

Onde σ_i são as matrizes de Pauli e $\mathbb{1}$ é a matriz identidade de dimensão 2. Temos que $\vec{\alpha}$ e β são, portanto, matrizes de dimensão 4.

Para o estudo do comportamento de portadores de carga em um material, devemos inserir na equação o potencial da rede $V(\vec{r}) = q\phi(\vec{r})$. Na presença de um campo magnético externo, tal que $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$, utilizaremos a substituição conhecida como acoplamento mínimo: $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$. A equação de Dirac para este sistema fica [31]:

$$i\hbar\partial_t |\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) + \beta mc^2 + q\phi(\vec{r}) \right] |\Psi(\vec{r}, t)\rangle \quad (\text{C.2})$$

A função de onda $\langle \vec{r} | \Psi(\vec{r}, t) \rangle$ para um Hamiltoniano independente do tempo pode ser escrita em termos dos spinores $\psi_+(\vec{r})$ e $\psi_-(\vec{r})$. Desta forma, ficamos com a seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$H|\psi\rangle = \left[\begin{pmatrix} 0 & c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) \\ c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 + q\phi & 0 \\ 0 & -mc^2 + q\phi \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = E|\psi\rangle \quad (\text{C.3})$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} mc^2 + q\phi - E & c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \\ c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) & -mc^2 + q\phi - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{C.4})$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (mc^2 + q\phi - E)\psi_+ + c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \psi_- = 0 & (a) \\ c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \psi_+ + (-mc^2 + q\phi - E)\psi_- = 0 & (b) \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

$$(b) \Rightarrow \psi_- = \frac{c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)}{E + mc^2 - q\phi} \psi_+ \quad (\text{C.6})$$

Substituindo (C.6) em (C.5a), temos:

$$(mc^2 + q\phi - E)\psi_+ + \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \frac{c^2}{E + mc^2 - q\phi} \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \psi_+ = 0 \quad (\text{C.7})$$

Chamando $E_S = E - mc^2$, como a energia equivalente à Equação de Schrödinger, podemos manipular o seguinte termo:

$$\frac{c^2}{E + mc^2 - q\phi} = \frac{1}{m} \frac{mc^2}{(E - mc^2 + mc^2 + mc^2 - q\phi)} = \frac{1}{2m} \frac{2mc^2}{(E_S + 2mc^2 - q\phi)} = \frac{1}{2m} \frac{1}{\left(1 + \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}\right)}$$

Sabendo que $\frac{E_S - q\phi}{mc^2} \ll 1$, podemos expandir a fração em Taylor até a segunda ordem, resultando:

$$\frac{1}{2m} \frac{1}{\left(1 + \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}\right)} \approx \frac{1}{2m} \left(1 - \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}\right) \quad (\text{C.8})$$

Substituindo (C.8) em (C.7):

$$(q\phi - E_S)\psi_+ + \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \frac{1}{2m} \left(1 - \frac{E_S - q\phi}{2mc^2}\right) \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \psi_+ = 0 \quad (\text{C.9})$$

Manipulando a equação e desprezando termos de ordem maior que $\mathcal{O}(v^2/c^2)$, chegamos a:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\vec{\Pi}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \cdot \vec{E} - \frac{\vec{\Pi}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\Pi} \times \vec{E}) \right] \psi_+ \\ & - \left[\frac{q\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{(q\hbar\vec{B})^2}{8m^3c^2} + \frac{q\hbar}{8m^3c^2} \vec{\Pi}^2 \sigma \cdot \vec{B} \right] \psi_+ = E_S \psi_+ \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Onde $\vec{\Pi} = (\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})$, $\vec{E} = -\nabla V(\vec{r})$ e E_S é a energia do sistema a menos da energia de repouso $E_0 = mc^2$.

A primeira parte da equação, entre colchetes, refere-se ao hamiltoniano do sistema e às correções de estrutura fina. O primeiro e o segundo termo são relativos à energia cinética dos elétrons e ao potencial da rede, respectivamente. O terceiro fator é conhecido como termo de Darwin: trata-se de uma correção relativística da interação entre os elétrons e o núcleo, devido a rápidas oscilações quânticas dos elétrons (*zitterbewegung*). Este termo afeta somente orbitais do tipo s. O quarto termo é a correção relativística da massa e o quinto descreve o acoplamento spin-órbita. A segunda parte da equação é relativa ao efeito Zeeman e suas correções de mais alta ordem.

A Figura C.1 ilustra os níveis de energia dos materiais HgTe e CdTe no ponto Γ à medida que as correções de estrutura fina são adicionadas.

Figura C.1: Correções de estrutura fina para o HgTe e CdTe. No caso do HgTe é possível observar a inversão das bandas Γ_6 e Γ_8 , enquanto no CdTe a ordem das bandas é direta. A imagem está fora de escala.

Com todas as correções, os níveis de energia do telureto de mercúrio se invertem em relação ao usual: um nível do tipo p está acima de outro do tipo s. Este efeito ocorre pelo forte acoplamento spin-órbita do material em adição à correção de massa relativística. O telureto de cádmio não apresenta o mesmo efeito, por ter correção relativística muito menor.

Na Figura C.2 são apresentadas as estruturas de banda do HgTe e do CdTe. Para o telureto

Figura C.2: Estrutura de bandas do telureto de mercúrio e telureto de cádmio. Para o HgTe é possível observar a inversão de bandas, enquanto o CdTe possui ordem de bandas direta.

de mercúrio, está presente a inversão de bandas, onde um nível do tipo p (Γ_8 - valência) tem energias maiores que o nível do tipo s (Γ_6 - condução). Note que, devido à concavidade da banda de buracos pesados (HH) do HgTe, não há gap para este material, podendo ser classificado como semimetal. O telureto de cádmio possui ordem das bandas direta e um gap entre Γ_6 e Γ_8 , tratando-se de um semiconductor.

APÊNDICE D – Fórmulas de Kubo-Green e Landauer-Büttiker

Sempre que ligamos um contato à amostra ou introduzimos sondas para realizar medidas, os instrumentos interagem com o conjunto analisado. É justamente dessa interação que retiramos informações do sistema - se nenhum efeito fosse observado nas sondas, não haveria o que ser mensurado. Por outro lado, os equipamentos também perturbam o material, e para estudar correntes em um sistema é necessário entender tais interações.

A **teoria da resposta linear** é utilizada na descrição de sistemas quânticos sob ação de perturbações externas fracas, em especial, aquelas existentes nos fenômenos de transporte. No desenvolvimento desta seção, seguimos as referências [32, 33]. Iniciando por um caso genérico onde o sistema isolado obedece à Equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(t)\rangle, \quad (\text{D.1})$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle, \quad (\text{D.2})$$

supomos que o sistema é perturbado por um Hamiltoniano H^{ext} . O novo autoestado deve obedecer

$$i\hbar \frac{\partial |\bar{\Psi}(t)\rangle}{\partial t} = [H + H^{\text{ext}}] |\bar{\Psi}(t)\rangle, \quad (\text{D.3})$$

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle, \quad (\text{D.4})$$

onde A é um operador tal que $A=1$ quando $H^{\text{ext}}=0$. Substituindo (D.4) em (D.3):

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\bar{\Psi}(0)\rangle \right] &= [H + H^{\text{ext}}] \left[e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\bar{\Psi}(0)\rangle \right], \\
 i\hbar \left[e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) HA + e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \partial_t A \right] |\Psi(0)\rangle &= H e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle + H^{\text{ext}} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle, \\
 \cancel{H e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle} + i\hbar e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \partial_t A |\Psi(0)\rangle &= \cancel{H e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle} + H^{\text{ext}} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle, \\
 i\hbar \partial_t A |\Psi(0)\rangle &= e^{i\frac{Ht}{\hbar}} H^{\text{ext}} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} A |\Psi(0)\rangle, \\
 i\hbar \partial_t A &\equiv H_H^{\text{ext}} A, \tag{D.5}
 \end{aligned}$$

onde H_H^{ext} é o Hamiltoniano externo na notação de Heisenberg. A equação (D.5) pode ser resolvida de forma iterativa:

$$\begin{aligned}
 \int dt' \partial_t A(t') &= -\frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') A(t'), \\
 \implies A(t) &= A(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') A(t'), \\
 \implies A(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') A(t') \right), \\
 A(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') + \frac{1}{\hbar^2} \int dt' \int dt'' H_H^{\text{ext}}(t') H_H^{\text{ext}}(t'') + \dots \tag{D.6}
 \end{aligned}$$

Para interações fracas, considerando apenas o termo linear, temos para os vetores da base

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') \right) |\Psi(0)\rangle + \dots \tag{D.7}$$

$$\langle \bar{\Psi}(t) | = \langle \Psi(0) | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int dt' [H_H^{\text{ext}}(t')]^\dagger \right) e^{i\frac{Ht}{\hbar}} + \dots \tag{D.8}$$

O Hamiltoniano é hermitiano, logo $[H_H^{\text{ext}}]^\dagger = H_H^{\text{ext}}$. Como os resultados físicos são mensurados pelos observáveis, precisamos entender como eles evoluem sob a ação do Hamiltoniano perturbado:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{ext}} \equiv \langle \bar{\Psi}(t) | \mathcal{O} | \bar{\Psi}(t) \rangle \tag{D.9}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle_{\text{ext}} &= \langle \Psi(0) | \left[1 + \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right] e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \mathcal{O} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right] | \Psi(0) \rangle, \\
 &= \langle \Psi_H | \mathcal{O}_H | \Psi_H \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_H | \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') \mathcal{O}_H(t) | \Psi_H \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_H | \mathcal{O}_H(t) \int dt' H_H^{\text{ext}}(t') | \Psi_H \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{\hbar^2} \langle \Psi_H | \int dt' \int dt'' H_H^{\text{ext}}(t') \mathcal{O}_H(t) H_H^{\text{ext}}(t'') | \Psi_H \rangle + \dots, \\
 &= \langle \Psi_H | \mathcal{O}_H | \Psi_H \rangle + \frac{i}{\hbar} \int dt' \langle \Psi_H | [H_H^{\text{ext}}(t'), \mathcal{O}_H(t)] | \Psi_H \rangle + \dots
 \end{aligned}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{ext} - \langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{i}{\hbar} \int dt' \langle \Psi_H | [H_H^{ext}(t'), \mathcal{O}_H(t)] | \Psi_H \rangle \quad (D.10)$$

A perturbação no sistema é dada pela equação (D.10), conhecida como **fórmula de Kubo**.

Se introduzimos um potencial elétrico como perturbação externa, chegamos a

$$\vec{j}(\vec{x}) = \int d^3x' \sigma(\vec{x}, \vec{x}') \varepsilon(\vec{x}'), \quad (D.11)$$

$$\sigma(\vec{x}, \vec{x}') = h \int d\alpha \int d\beta \left[-\frac{d}{dE} f(E_\alpha) \right] \delta(E_{\beta\alpha}) \vec{j}_{\beta\alpha}(\vec{x}) \otimes \vec{j}_{\alpha\beta}(\vec{x}'), \quad (D.12)$$

onde ε é o campo elétrico, $\vec{j}$ a densidade de corrente e σ o tensor de condutividade. A expressão (D.11) é uma reformulação microscópica não local da lei de Ohm. Luttinger e Kohn mostraram que em aproximação de mais baixa ordem, a fórmula de Kubo cai na relação semiclássica de Drude-Boltzmann-Sommerfeld para a corrente, na presença de campo elétrico homogêneo.

Nem sempre a aproximação linear será boa para o cálculo das propriedades de transporte. A temperaturas finitas, a primeira ordem será suficiente quando a diferença de potencial entre dois contatos for muito menor que $k_B T$. Em geral, sempre que a probabilidade de transmissão eletrônica dos contatos para a amostra for (aproximadamente) independente da energia dos elétrons, é possível utilizar a teoria de resposta linear.

Sob outro ponto de vista, Landauer propôs para a condutância de um sistema a relação

$$G = \frac{2e^2}{h} M T, \quad (D.13)$$

onde M é o número de modos dos elétrons no material e T é a probabilidade média de transmissão dos portadores de carga através do sistema. As correções de ordem mais alta com relação ao modelo de Kubo estão contidas nos termos M e T da equação. Uma forma de obtê-los é aplicar o método das funções de Green ao sistema físico estudado. Este formalismo está apresentado nas seções seguintes.